

Inaugural-Dissertation

**zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich-Mathematischen
Gesamtfakultät
der Ruprecht-Karls-Universität
Heidelberg**

Vorgelegt von
Dipl.-Phys. Sven Bernitt
aus Bad Friedrichshall

Tag der mündlichen Prüfung: 17.04.2013

**Resonante Anregung
astrophysikalischer Röntgen-Übergänge
in hochgeladenen Eisenionen mit dem
Freie-Elektronen-Laser LCLS**

Gutachter: PD Dr. José R. Crespo López-Urrutia
PD Dr. Wolfgang Quint

Resonante Anregung astrophysikalischer Röntgen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit dem Freie-Elektronen-Laser LCLS

Das Spektrum von Fe^{16+} , beobachtet in vielen astrophysikalischen Objekte und in Laborexperimenten, wird nur schlecht von Plasma-Modellen wiedergegeben. Insbesondere für die beiden, 3C und 3D genannten, stärksten $2p - 3d$ -Übergänge um 800 eV ist das Intensitätsverhältnis 3C/3D immer kleiner als vorhergesagt. Es war bisher nicht möglich, dieses Rätsel zu lösen, da die Anregung immer durch Stöße erfolgte, was die Interpretation der Daten erschwerte. In der vorliegenden Arbeit wurde resonante Anregung dieser und anderer Übergänge mit hochbrillanten Röntgen-Pulsen von einem Freie-Elektronen-Laser dazu verwendet, dieses Problem zu enträtseln. In einer Elektronenstrahlionenfalle wurden die Ionen bestrahlt, während die Photonenenergie durchgestimmt wurde. So war es erstmals möglich, das Verhältnis der Oszillatorenstärken unabhängig von Stoßprozessen zu messen. Das Ergebnis widerspricht Rechnungen der elektronischen Strukturen, die bisher für ausreichend genau gehalten wurden. So wird demonstriert, daß die Problematik bereits auf der Ebene der Elektronenwellenfunktionen auftritt und nicht primär in der Behandlung von Stoßprozessen oder Plasmaeffekten. Weiterhin wurden die Übergangsenergien von Resonanzen aus Fe^{13+} , Fe^{14+} , Fe^{15+} und Fe^{16+} zwischen 795 und 830 eV mit Unsicherheiten bis hinunter zu 240 meV gemessen, indem sie mit nahegelegenen Übergängen Wasserstoff-artiger Ionen verglichen wurden. Das neuartige Experiment weitet den für Laserspektroskopie zugänglichen Spektralbereich bis in die Röntgen-Region aus und eröffnet neue Möglichkeiten für Grundlagenexperimente und Anwendungen.

Resonant excitation of astrophysical X-ray transitions in highly charged iron ions with the free-electron laser LCLS

The spectrum of Fe^{16+} , appearing in astrophysical objects and in laboratory experiments, has been only poorly fit by plasma models. In particular, for the two strongest $2p - 3d$ transitions around 800 eV, dubbed 3C and 3D, the intensity ratio 3C/3D is always lower than predicted. It was hitherto not possible to resolve this conundrum, since collisional excitation was always critically complicating analysis. In this work, resonant excitation of these and other transitions with ultrabright X-ray pulses from a free-electron laser was used to unravel this problem. In an electron beam ion trap, the ions were irradiated while the photon energy was tuned. This made possible for the first time to measure the ratio of oscillator strengths independently of collisional processes. The result disagrees with electronic structure calculations hitherto believed to be sufficiently accurate. This demonstrates that the problem arises already at the level of electronic wave functions, and not primarily in the treatment of collisional processes or plasma effects. Furthermore, the transition energies of resonances in Fe^{13+} , Fe^{14+} , Fe^{15+} and Fe^{16+} between 795 and 830 eV were determined with uncertainties as low as 240 meV by comparison with closely located transitions of hydrogenic ions. The novel experiment extends the reach of laser spectroscopy into the X-ray region, opening new possibilities for both fundamental physics and applications.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	5
Inhaltsverzeichnis	7
1 Einleitung	11
2 Grundlagen	19
2.1 Hochgeladene Ionen	19
An- und Abregungsprozesse	19
Ionisationsprozesse	22
Rekombinationsprozesse	23
2.2 Neon-artiges Eisen	23
2.3 Laserspektroskopie	25
2.4 Freie-Elektronen-Laser	26
Synchrotronstrahlung	27
Undulatoren	28
Microbunching	29
Verstärkung und SASE	31
2.5 Elektronenstrahlionenfallen	31
Der Elektronenstrahl	32
Das elektrische Potential	33
Bewegung von Ionen in einer EBIT	35
Prozesse in einer EBIT	36
2.6 Laserspektroskopie an Ionen in einer EBIT	36
Bisherige Arbeiten zur Laserspektroskopie mit EBITs	36
Winkelverteilung der Fluoreszenz	37
3 Experiment	41
3.1 Die Linac Coherent Light Source	41
Linearbeschleuniger	42
Undulator	42
Der SXR-Hutch	43
3.2 Die FLASH-EBIT	47

	Elektronenkanone	48
	Magnet	48
	Driftröhren	49
	Kollektor	49
	Elektrostatischer Ablenker	50
	Vakuum- und Injektionssystem	52
	Erzeugung von Eisenionen	52
3.3	Die FLASH-EBIT als LCLS-Endstation	53
	Verkleinerung und Vakuumsystem	54
	Strahlstopper	54
	Maschinenfüße	55
	Strahlunterbrecher mit Strahlmonitor	57
	Strahlstromstabilisierung	57
3.4	Detektoren	60
	Germanium-Detektoren	60
	MCP-Detektor	61
	Mikrokalorimeter	62
	Gitterspektrometer	63
	Detektorenanordnung	63
3.5	Herstellung des Überlapps von Ionenwolke und Photonenstrahl	64
3.6	Untergrundunterdrückung durch Zeitkoinzidenz	68
3.7	Datenaufnahmesysteme	70
	Eignung für die Messung von relativen Fluoreszenzraten	71
4	Datenauswertung	73
4.1	Datenreduktion	73
4.2	Gewinnung von Spektren	74
	Zeitkoinzidenz	74
	Mehrfach-Photonen-Nachweis	76
	Handhabung von Intensitätsfluktuationen	79
	Fehlerfortpflanzung	80
	Implementierung der Datenverarbeitung	81
4.3	Energiekalibration	82
	Aufspaltung der Lyman-Linien	83
	Einfluß der Abstrahlcharakteristiken	84
	Position von F-Ly- α und Abschätzung des Fehlers	85
5	Ergebnisse	87
5.1	Überblick über die aufgenommenen Daten	87
5.2	Messungen von Resonanzenergien	93
	Instabilitäten als systematischer Fehler	95
	Resonanzen von Fe XV und Fe XIV	96

	Abschätzung des Einflusses von C auf die Position von 3D	96
	Vergleich mit bisherigen Messungen und Rechnungen	100
5.3	Das Intensitätsverhältnis von 3C und 3D	102
	Abschätzung der dominanten Fehlerbeiträge	105
	Bezug der gemessenen Größe zu anderen Größen	107
	Vergleich mit bisherigen Messungen und Rechnungen	108
	Großskalige MCDF-Rechnungen	111
	Interpretation	112
6	Rekapitulation und Ausblick	113
	Symbole und Abkürzungen	119
	Literaturverzeichnis	125
	Danksagung	135

Kapitel 1

Einleitung

Um die Natur von Licht und Farbe zu ergründen verwendete Isaac Newton gläserne Prismen [88]. Er gelangte dabei zu der für seine Zeit neuartigen Auffassung, daß weisses Licht, bis dahin für eine grundlegende Erscheinungsform gehalten, zusammengesetzt ist aus Licht unterschiedlicher Farbe und unterschiedlichen Brechungsverhaltens.

Werden Salze in einer heißen Flamme verdampft und verbrennen, so nimmt die Flamme eine für das Salz charakteristische Färbung an. Der Chemiker Robert Wilhelm Bunsen versuchte Mitte der 50er-Jahre des neunzehnten Jahrhunderts in Heidelberg aus dieser Färbung auf die chemische Zusammensetzung der Salze zu schließen. Einem Vorschlag des Physikers Gustav Robert Kirchhoff folgend wandte sich Bunsen der Zerlegung des Lichts der Flammen mit Hilfe von Prismen zu [88]. Gemeinsam entdeckten beide die für alle Elemente charakteristischen Linienemissionsspektren und begründeten damit die Methodik der Spektralanalyse [88]. Die sich damit auftuenden wissenschaftlichen Möglichkeiten wurden von Bunsen durch die Entdeckung zweier neuer Elemente, Cäsium und Rubidium, aufgezeigt [74]. In der zweiten Hälfte des neunzehnten Jahrhunderts entwickelte sich die Analyse atomarer Spektren zu einer der fruchtbarsten naturwissenschaftlichen Techniken, die zusammen mit dem von Kirchhoff eingeführten Begriff des „schwarzen Körpers“ direkt zur Entwicklung der Quantenmechanik zu Beginn des zwanzigsten Jahrhunderts führte.

Im Jahr 1802 hatte William Hyde Wollaston im kontinuierlichen Spektrum der Sonne dunkle Linien ausgemacht, die 1814 von Joseph Fraunhofer systematisch untersucht wurden [88]. Indem er Sonnenlicht vor dem Eintritt in einen Spektrographen durch eine Kochsalz verdampfende Flamme scheinen ließ, zeigte Kirchhoff die perfekte Übereinstimmung zweier dunkler Linien im Sonnenspektrum mit zwei charakteristischen Linien von Natrium [72, 73]. Es wurde deutlich, daß Sterne aus den selben Elementen aufgebaut sind, die auch auf der Erde zu finden sind. Die Spektralanalyse von Sternenlicht ermöglicht es deshalb durch den Vergleich mit auf der Erde im Labor gewonnenen Spektren auf die in den Sternen vorhandenen Elemente zu schließen.

In Spektren der Sonnenkorona, die während einer totalen Sonnenfinsternis

am 7. August 1869 aufgenommen wurden, entdeckte man eine grüne Linie. Diese konnte keinem der bekannten Elemente zugeordnet werden, und es wurde angenommen, daß sie von einem bis dahin unbekannten Element stammte, das man „Coronium“ nannte [23]. Erst 1933 entdeckte Walter Grotrian, daß einige Spektrallinien auch von sehr hoch geladenen Ionen stammen könnten [50] und nicht von hypothetischen Elementen, die auf der Erde nicht auftreten. Diese Deutung stand am Anfang im Gegensatz zu den damals gängigen Vorstellungen über die Temperatur der Sonnenkorona und wies darauf hin, daß Sterne weitaus heißer waren, als gedacht [27]. Im Jahr 1942 identifizierte dann Bengt Edlén die grüne Linie des Sonnenkorona-Spektrums als einen Übergang in dreizehnfach positiv geladenem Eisen [37, 38]. Solche Ionen, denen im Vergleich zum neutralen Atom viele Elektronen fehlen, werden daher als hochgeladen bezeichnet.

Die Energieniveaus von Ionen gleicher Elektronenzahl aber unterschiedlicher Kernladungszahl Z skalieren grob wie Z^2 . Aus diesem Grund liegen Übergänge, die in neutralen Atomen oder niedrig geladenen Ionen im optischen Wellenlängenbereich liegen, im Fall hochgeladener Ionen bei weitaus kürzeren Wellenlängen, also im Ultraviolett oder im Röntgen-Bereich. Da die Atmosphäre für diese Teile des elektromagnetischen Spektrums nicht durchlässig ist, sind spektroskopische astronomische Beobachtungen vom Boden aus nicht möglich. Erst Raketen- und Ballonmissionen, und in jüngerer Zeit im Orbit kreisende Röntgen-Weltraumteleskope, wie ROSAT, Chandra und XMM-Newton, erlauben es Röntgenstrahlung von astrophysikalischen Quellen zu beobachten [7]. Erst dadurch wurde ein großer Teil der Physik hochgeladener Ionen in solchen Quellen zugänglich gemacht. Eine solche Quelle ist in Abbildung 1.1 gezeigt. Es handelt sich dabei um Capella (α Aurigae), ein binäres Sternsystem und eine der hellsten koronalen Röntgenquellen am Nachthimmel [4].

Licht ist der wichtigste Informationsträger, der uns von astrophysikalischen Objekten erreicht und die in den Spektren enthaltenen Informationen helfen beim Verständnis dieser Objekte. Zu diesem Zweck wird basierend auf einem theoretischen Modell eine Vorhersage des Spektrums versucht und diese dann mit dem beobachteten Spektrum verglichen. Das Modell wird nun verfeinert, bis es mit der Beobachtung übereinstimmt. Auf diese Weise können zum Beispiel Modelle von Sternatmosphären oder Supernovaresten erarbeitet werden.

Die innere Struktur eines Sterns ist hauptsächlich bestimmt durch den Energietransport in seinem Inneren, dieser kann durch Wärmeleitung, durch Konvektion und durch Strahlung erfolgen [118]. Bereits im Jahr 1905 erkannte Karl Schwarzschild, daß der Energietransport in Sternen durch Strahlung dominiert wird [116]. Dabei werden im Sterninneren erzeugte Photonen an den Bestandteilen des Sternplasmas gestreut [118]. Typische mittlere freie Weglängen liegen dabei in der Größenordnung von weniger als einem Millimeter. Obwohl hochgeladene Ionen in einem Stern wie der Sonne nur einen kleinen Teil der Masse ausmachen, tragen



Abbildung 1.1. Der Nachthimmel, aufgenommen in Heidelberg mit Blick in Richtung Osten am 12. August 2012 um 3 Uhr 55. Der Stern Capella (α Aurigae) ist mit einem roten Kreis markiert.

sie dennoch entscheidend zur Energiebilanz eines solchen Sterns bei. Einerseits sind die häufigeren leichten Elemente bei den herrschenden Temperaturen vollständig ionisiert und besitzen deshalb keine Elektronenhüllen mehr, an denen Photonen streuen könnten. Andererseits skalieren die Übergangsraten erlaubter elektrischer Dipolübergänge mit der vierten Potenz der Kernladungszahl Z . Ein einzelnes hochgeladenes Ion kann also eine weitaus größere Zahl Photonen pro Zeiteinheit streuen, als ein niedergeladenes Ion gleicher Elektronenzahl. Hinzu kommt, daß die von hochgeladenen Ionen typischerweise gestreuten Photonen eine deutlich höhere Energie pro Photon transportieren.

Die Effektivität mit der ein Ion Photonen streut wird beschrieben durch einen wellenlängenabhängigen Absorptionskoeffizienten [116, 118]. Die Gesamtheit aller Absorptionskoeffizienten gewichtet und gemittelt über alle Wellenlängen ergibt eine als Opazität bezeichnete Größe [116], die als Parameter in Sternmodelle eingeht. Da resonante Photonenstreuung wegen ihrer resonanten Natur sehr effektiv zur Streuung beiträgt und gleichzeitig eine starke Wellenlängenabhängigkeit aufweist, ist für ein umfassendes Modell eine möglichst genaue Kenntnis sowohl der Resonanzwellenlängen als auch der Resonanzstärken unerlässlich. Aus der elektronischen Struktur der einzelnen Ionen folgt so letztendlich der Aufbau des Sterns. Über die Opazität gehen atomphysikalische Modelle direkt in astrophysikalische Modelle ein.

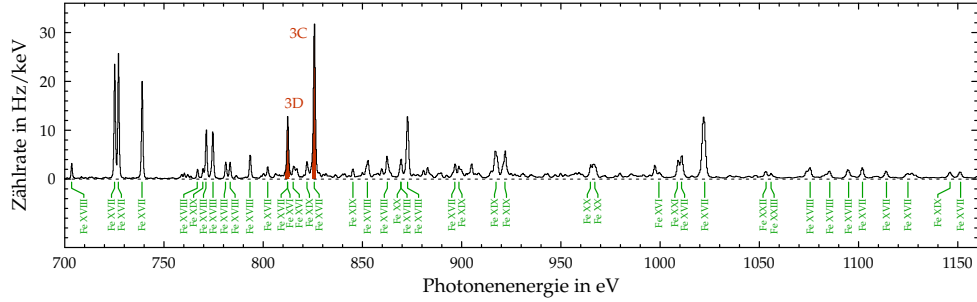


Abbildung 1.2. Ein Röntgenspektrum von Capella (α Aurigae), gemessen mit dem Röntgen-Weltraumteleskop Chandra [64]. Der gemessene Photonenfluss ist über der Photonenenergie aufgetragen. Die von verschiedenen Ladungszuständen hochgeladenen Eisens stammenden Emissionslinien sind in grün beschriftet. Im gezeigten Energiebereich dominiert Eisen das Spektrum von Capella deutlich. Die Fe-XVII-Linien 3C (Übergang $(2p^5)_{1/2}(3d)_{3/2} \rightarrow 2p^6$) und 3D (Übergang $(2p^5)_{3/2}(3d)_{5/2} \rightarrow 2p^6$) sind rot hervorgehoben.

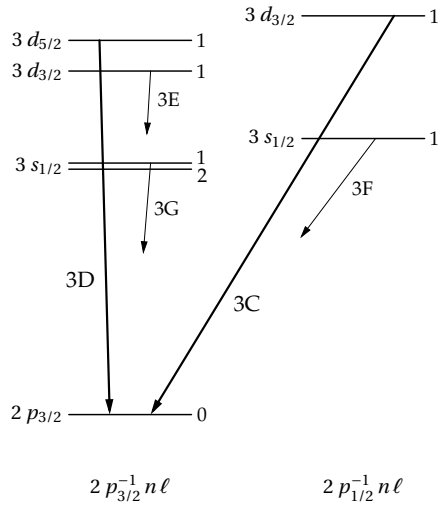


Abbildung 1.3. Ein Teil des Termschemas von Neon-artigem Eisen. Eingezeichnet sind die für die vorliegende Arbeit zentralen Übergänge, die als 3C und 3D bezeichnet werden. Weitere prominente Übergänge dieses Ions, die ebenfalls von $n = 3$ nach $n = 2$ erfolgen, sind angedeutet.

Zwei der stärksten Emissionslinien in zahlreichen astrophysikalischen Spektren stammen von Neon-artigem Fe XVII. Als Beispiel ist in Abbildung 1.2 ein mit Chandra aufgenommenes Röntgenspektrum von Capella gezeigt. Die beiden Linien wurden 1973 erstmals im Spektrum der Sonne entdeckt [92] und werden üblicherweise als 3C und 3D bezeichnet. Sie stammen von den Übergängen $(2p^5)_{1/2}(3d)_{3/2} (J = 1) \rightarrow 2p^6 (J = 0)$ und $(2p^5)_{3/2}(3d)_{5/2} (J = 1) \rightarrow 2p^6 (J = 0)$. Der relevante Teil des Termschemas von Fe XVII ist in Abbildung 1.3 gezeigt. Von besonderer Bedeutung ist hier das Verhältnis der Intensitäten beider Linien. Dieses war Gegenstand einer Kontroverse, die bis heute nicht beigelegt werden konnte. In Spektren der Sonne fand man Werte von 1,63 [16] bis 2,75 [86], und Beobachtungen von Capella ergaben Verhältnisse von 2,42 [4] bis 3,02 [87]. Messungen an NGC 4636 ergaben einen Wert von $2,31 \pm 0,18$ [119].

Um die Ursachen dieser starken Variation zu ergründen wurden Labor-Messungen durchgeführt. Dabei wurde das Fusionsplasma im Princeton-Large-Torus-Tokamak (PLT) spektroskopisch untersucht und es wurden Intensitätsverhältnisse von $2,04 \pm 0,42$ bis $3,33 \pm 0,56$ gemessen [6, 8], die ebenso stark variierten wie die aus astronomischen Beobachtungen stammenden. Dies widersprach den Ergebnissen von Rechnungen basierend auf Modellen der Plasmen. Diese sagen typischerweise ein weitestgehend von den Plasmaparametern, wie zum Beispiel der Temperatur, unabhängiges Verhältnis vorher [20].

Weitere Messungen mit einer Elektronenstrahlionenfalle (EBIT) am Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) deuteten darauf hin, daß die Position der Linie 3D mit derjenigen einer bisher unbeobachteten Linie von Natrium-artigem Fe XVI innerhalb der erreichten spektroskopischen Auflösung übereinstimmt [20]. Verschiedene Anteile der beiden Ladungszustände am Plasma würden dann zu verschiedenen scheinbaren Linienverhältnissen führen, wobei die als C bezeichnete hypothetische Linie jeweils unterschiedliche Anteile zu 3D beitrüge. Basierend auf der Annahme der Existenz von C kann über die Ladungszustandsverteilung aus dem gemessenen Verhältnis von 3C und 3D auf die Temperatur des Plasmas geschlossen werden. Auf diese Weise wurden in der Folge durchaus auch Spektren der Sonne analysiert [18].

Die Koinzidenz zweier Linien konnte also die starke Variation des beobachteten Intensitätsverhältnisses erklären. Alle verfügbaren Modelle sagen jedoch Verhältnisse von 3,43 oder mehr voraus, die generell größer sind als astrophysikalische und im Labor gewonnene Werte. Dennoch ergaben auch Messungen, bei denen die mögliche Intensitätsverfälschung durch C berücksichtigt wurde, Verhältnisse, die deutlich kleiner ausfielen, als die vorhergesagten [20]. Außerdem haben Messungen des absoluten Wirkungsquerschnitts der Anregungen der betreffenden Übergänge durch Elektronenstoß ebenfalls deutliche Abweichungen von den verfügbaren Modellen gezeigt [21].

Es befinden sich also Labormessungen und Beobachtungen astronomischer Röntgen-Quellen in guter Übereinstimmung, während die verfügbaren theoretischen Ansätze zur Vorhersage des Intensitätsverhältnisses eine systematische Abweichung hin zu höheren Werten aufweisen. Eine mögliche Erklärung hierfür liegt darin, daß die Anregung der Übergänge in den betrachteten Plasmen vornehmlich durch Elektronenstoß erfolgt und daß dabei Stoßeffekte auftreten, die in den Modellen nicht hinreichend akkurat wiedergegeben werden [45]. Es wurden außerdem ein Vielzahl anderer möglicher Erklärungen vorgeschlagen, die die Ursache der Abweichungen vornehmlich in Effekten suchten, die aus den Bedingungen im betrachteten Plasma stammen [22, 44, 90]. Eine gänzlich andere Vermutung ist, daß die in den Modellen eingesetzten elektronischen Wellenfunktionen nicht ausreichend genau bekannt sind. Dies kann daraus resultieren, daß bei der prinzipiell nicht komplett analytisch möglichen Behandlung der Wellenfunktionen [46, 56] nu-

merische Methoden zu Einsatz kommen, die zur Begrenzung des Rechenaufwands auf Näherungen angewiesen sind.

Ein Argument für die Annahme, daß die verwendeten Wellenfunktionen wenigstens teilweise für die Abweichung verantwortlich sind, ist, daß die beobachteten Verhältnisse anderer Linien zu 3D in den Modellen üblicherweise sehr viel besser mit den Beobachtungen übereinstimmen. Daraus kann gefolgert werden, daß die Ursache des Problems wahrscheinlich in 3C zu suchen ist. Bei 3C handelt es sich um einen Dipol-erlaubten Übergang, bei dem der Wirkungsquerschnitt bei Stoßanregung nahezu proportional zur Oszillatorstärke ist, die wiederum nur von der elektronischen Struktur des Ions abhängt [54].

In allen bisher durchgeführten Experimenten zur Klärung des 3C/3D-Problems wurde spektroskopisch die Emission von Plasmen untersucht. Unter diesen Bedingungen war es nicht möglich, kollektive Plasmaeffekte von der Struktur der einzelnen Ionen zu trennen. Zur Klärung der offenen Fragen war ein konzeptionell neues Experiment erforderlich.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein solches Experiment durchgeführt, bei dem ein Freie-Elektronen-Laser in Kombination mit einer Elektronenstrahlionenfalle dazu verwendet wurde, die Übergänge 3C und 3D direkt photo-nisch anzuregen. Dadurch wurde es möglich, die elektronische Struktur der Ionen unabhängig von dem sie umgebenden Plasma zu untersuchen. Dabei wurde die Methodik der Laserspektroskopie erstmals im Röntgen-Bereich um 800 eV Photonenenergie angewandt. Es wurde das Verhältnis der Oszillatorstärken der zu 3C und 3D gehörigen Übergänge gemessen. Weiterhin wurden die Resonanzenergien mehrerer Übergänge in Neon-, Natrium-, Magnesium- und Aluminium-artigem Eisen mit hoher Genauigkeit bestimmt. Diese Arbeit beschreibt den Aufbau des Experiments, die durchgeführte Auswertung der Daten und die daraus erhaltenen Ergebnisse.

Diese Arbeit ist wie folgt strukturiert. Nach dieser Einführung werden im zweiten Kapitel die für den Rest der Arbeit notwendigen Konzepte eingeführt. Es werden die relevanten Stoßprozesse zwischen hochgeladenen Ionen und Photonen oder Elektronen erläutert. Es wird kurz auf Neon-artiges Eisen eingegangen. Es folgen kurze Beschreibungen laserspektroskopischer Methoden und der Funktionsweise eines Freie-Elektronen-Lasers. Danach werden der Aufbau einer Elektronenstrahlionenfalle und deren besondere Eignung für die Laserspektroskopie an hochgeladenen Ionen diskutiert.

Im sich anschließenden dritten Kapitel wird näher auf die einzelnen Komponenten des durchgeführten Experiments eingegangen. Besonderes Augenmerk liegt dabei auch auf den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Komponenten.

Das vierte Kapitel widmet sich der Auswertung der im Experiment gewonnenen Daten. Es werden die notwendigen Schritte zur Gewinnung von Spektren

und die dafür entwickelte Software erläutert. Außerdem wird auf die Verwendung Wasserstoff-artiger Ionen zur absoluten Energiekalibration eingegangen.

Die Ergebnisse der Datenauswertung werden im fünften Kapitel präsentiert. Zuerst wird das für diese Arbeit zentrale gemessene Verhältnis der Oszillatorstärken von 3C und 3D diskutiert. Dabei erfolgen auch eine Untersuchung des experimentellen Fehlers und ein Vergleich mit verfügbaren Theoriewerten. Es wird der Versuch einer Interpretation des gefundenen Ergebnisses unternommen. Es folgen die gemessenen Resonanzenergien und ein Vergleich mit bisherigen Messungen und Rechnungen.

Das letzte Kapitel fasst die vorhergehenden zusammen. Es wird hierbei auf die erzielten Fortschritte auf experimenteller Seite genauso eingegangen, wie auch auf die gewonnenen Erkenntnisse. Den Abschluß bildet ein kurzer Ausblick in die Zukunft, bei dem versucht wird, aus den Resultaten dieser Arbeit folgende neue Möglichkeiten aufzuzeigen.

Kapitel 2

Grundlagen

Dieses Kapitel führt die für diese Arbeit notwendigen Konzepte und Begriffe ein. Im ersten Teil wird dabei auf die Physik hochgeladener Ionen eingegangen. Es schließt sich eine Betrachtung des für diese Arbeit zentralen Ions Fe^{16+} an. Der dritte Teil befasst sich mit Laserspektroskopie und im vierten Teil wird die Funktionsweise von Freie-Elektronen-Lasern erläutert. In den letzten beiden Abschnitten wird die Funktionsweise einer Elektronenstrahlionenfalle und deren Verwendung zur Laserspektroskopie betrachtet. Besonderes Augenmerk liegt auf den für das Verständnis der folgenden Kapitel notwendigen Sachverhalte. Tiefergehende Betrachtungen finden sich in der jeweils im Text angegebenen Literatur.

2.1 Hochgeladene Ionen

Es ist nicht klar definiert, wann ein Ion als hochgeladen gilt [47]. Einer gängigen Redeweise nach werden Ionen, die mehr als die Hälfte ihrer Elektronen verloren haben, als hochgeladen bezeichnet. Prinzipiell handelt es sich bei einem hochgeladenen Ion, wie auch bei einem niedergeladenen Ion oder einem neutralen Atom, um ein gebundenes System aus einem Atomkern und einem oder mehreren Elektronen. Einen Sonderfall stellen komplett ionisierte Ionen dar, die nur noch aus dem Kern bestehen. Bei allen anderen finden eine Reihe Wechselwirkungen der Elektronenhülle mit freien Elektronen und Photonen statt. Im Folgenden werden ionische Prozesse vorgestellt, die analogerweise auch in Atomen stattfinden können.

An- und Abregungsprozesse

Ein Ion kann durch Zuführung von Energie angeregt werden, das heißt daß mindestens ein Hüllenelektron auf ein höheres Energieniveau gehoben wird. Wird die Energie durch Stoß mit einem Elektron übertragen, dann spricht man von Elektronenstoßanregung.



Der Wirkungsquerschnitt für eine solche Anregung kann näherungsweise angegeben werden [63, 117]. In der sogenannten Bethe-Approximation ist

$$\sigma_{\text{EA}} = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}} \frac{I_{\text{H}} a_0^2}{E_e (E_k - E_i)} \cdot g f_{ij} . \quad (2.2)$$

Neben der Ionisationsenergie des Wasserstoffs I_{H} und dem klassischen Bohrradius a_0 gehen die Energie des Stoßenden Elektrons E_e und die Energien E_i des Ausgangszustands und E_k des angeregten Zustands ein. Der Wirkungsquerschnitt ist proportional zur sogenannten Oszillatorstärke f_{ij} und zum sogenannten Gaunt-Faktor g . Letzterer ist eine Korrektur quantenmechanischer Natur zum klassischen Absorptionsquerschnitt und enthält die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Endenergien des einfallenden Elektrons als Funktion der Ausgangsenergien.

Findet der Energieübertrag durch ein Photon statt, so nennt man den Prozess Photoanregung.



Eine Anregung durch ein Photon kann nur dann erfolgen, wenn das Photon die zum Abstand zweier Energieniveaus passende Energie mitbringt. Photoanregung ist deshalb ein resonanter Prozess, wohingegen Elektronenstoßanregung auch nicht-resonant erfolgen kann.

Fällt ein Elektron in einem solcherart angeregten Ion auf ein tieferes energetisches Niveau, so kann dies unter Aussendung eines oder mehrerer Photonen erfolgen, die die freigesetzte Energie abtransportieren.



Die Energie kann auch im Ion umverteilt werden. Erhält ein schwächer gebundenes Hüllenelektron derart mehr Energie als seine Bindungsenergie, dann kann es das Ion verlassen und überschüssige Energie in Form von kinetischer Energie übernehmen.



Dies wird als Auger-Effekt oder Autoionisation bezeichnet. Die Ladung des Ions wird dabei um eins erhöht.

Betrachtet man Absorption und Emission von Photonen nicht als Stoßprozesse, sondern als Wechselwirkung der Hüllenelektronen eines Ions mit einem Strahlungsfeld, dann ist die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit P_{ik} , daß ein Ion ein Photon der Frequenz ν absorbiert und vom Zustand i in den Zustand k angeregt wird, gegeben als

$$P_{ik} = B_{ik}^\nu \cdot \rho(\nu) . \quad (2.6)$$

Dabei ist $\rho(\nu)$ die spektrale Energiedichte des Strahlungsfeldes und B_{ik}^ν nennt man den Einstein-Koeffizienten der Absorption [33]. Da die Übergangswahrscheinlichkeit unabhängig von der Wahl der Frequenzeinheit sein muss, hängt der absolute

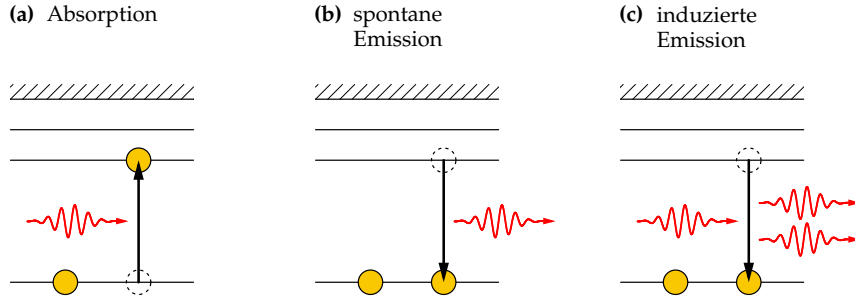


Abbildung 2.1. Bei der Absorption (a), wird ein Elektron auf ein angeregtes Niveau gehoben. Dabei muss die Energie des absorbierten Photons der Energiedifferenz von End- und Ausgangsniveau entsprechen. Die Abregung aus einem angeregten Zustand kann spontan (b) oder induziert durch ein weiteres Photon (c) erfolgen.

Wert von B_{ik}^ν von der Wahl dieser Einheit für $\rho(\nu)$ ab. Im weiteren wird ν so verwendet, daß

$$E_\gamma = h\nu \quad (2.7)$$

mit der Photonenenergie E_γ gilt.

Ein Ion in einem angeregten Zustand k kann sich nun ohne weitere äußere Einwirkung spontan durch Aussendung eines Photons in den energetisch tiefer liegenden Zustand i abregen. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für eine solche spontane Emission ist A_{ki} und wird als Einstein-Koeffizient der spontanen Emission bezeichnet [33].

In Anwesenheit eines äußeren Strahlungsfeldes kann außerdem eine Emission induziert werden. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für eine solche induzierte Emission ist

$$P_{ki} = B_{ki}^\nu \cdot \rho(\nu) \quad (2.8)$$

und B_{ki}^ν wird Einstein-Koeffizient der induzierten Emission genannt [33]. Alle drei Prozesse – Absorption, spontane Emission und induzierte Emission – sind in Abbildung 2.1 illustriert. Die Koeffizienten B_{ik}^ν und B_{ki}^ν sind über die statistischen Gewichte g_i und g_k der beteiligten Zustände verknüpft.

$$g_i B_{ik} = g_k B_{ki} \quad (2.9)$$

Alle Einstein-Koeffizienten lassen sich durch das Übergangsmatrixelement M_{ik} ausdrücken [25, 33].

$$A_{ki} = \frac{1}{g_k} \cdot \frac{16\pi\nu^3}{3\varepsilon_0 h c^3} \cdot |M_{ik}|^2 \quad (2.10a)$$

$$B_{ki}^\nu = \frac{1}{g_i} \cdot \frac{2\pi^2}{3\varepsilon_0 h^2} \cdot |M_{ik}|^2 = \frac{g_k}{g_i} B_{ik}^\nu \quad (2.10b)$$

Es werden eine ganze Reihe Größen zur Beschreibung der Stärke eines Übergangs nebeneinander verwendet. Die Absorption kann über den frequenzabhängigen Absorptionskoeffizienten $\alpha_{ik}(\nu)$ ausgedrückt werden. Dieser gibt an, welcher Anteil der bei einer Frequenz ν einfallenden Strahlungsleistung absorbiert wird [33]. Integriert man $\alpha_{ik}(\nu)$ über alle Frequenzen auf, dann ist die resultierende Größe proportional zu B_{ik}^ν . Eine andere Größe ist die schon bei der Elektronenstoßanregung eingeführte Oszillatorstärke f_{ik} , die so definiert ist, daß sie angibt, welcher Anteil der im Zustand i absorbierten Strahlungsleistung zu einem Übergang in den Zustand k führt [33]. Die Oszillatorstärke ist ebenfalls proportional zum Absorptionskoeffizienten.

$$f_{ik} = \frac{m_e \epsilon_0 h \nu_{ik}}{\pi^2 e^2} \cdot B_{ik}^\nu \quad (2.11)$$

Hier ist ν_{ik} die Frequenz des betrachteten Übergangs. Eine dazu proportionale Größe ist die sogenannte Linienstärke S_{ik} [33] mit

$$S_{ik} = \frac{h \nu_{ik}}{c} \cdot B_{ik}^\nu \quad (2.12)$$

Diese Größe ist gleichzeitig das Integral des Absorptionsquerschnitts $\sigma_{ik}(\nu)$ über alle Frequenzen.

Ionisationsprozesse

Ist die kinetische Energie eines Elektrons beim Stoß mit einem Ion höher als das Ionisationspotential, dann kann ein Hüllenelektron aus dem gebundenen Zustand ins Kontinuum befördert werden. Dies erfolgt entweder direkt oder über Autoionisation.



So wird der Ladungszustand des Ions um eins erhöht. Dieser Vorgang wird Elektronenstoßionisation genannt. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Vorgang kann mit der empirischen Lotz-Formel [13] angenähert werden.

$$\sigma_{EI} = \sum_i a_i k_i \frac{\ln E_e - \ln E_B}{E_e E_B} \left\{ 1 - b_i \left[c_i \left(1 - \frac{E_e}{E_B} \right) \right] \right\} \quad (2.14)$$

Dabei ist E_B die Bindungsenergie des freigesetzten Elektrons, die sich zusammen mit der kinetischen Energie E_e des stoßenden Ions auf die beiden resultierenden freien Elektronen verteilt. Die Summation erfolgt über alle Unterschalen des Ions und k_i ist die Anzahl der Elektronen in Schale i . Die Parameter a_i , b_i und c_i sind Elementabhängig und müssen experimentell bestimmt werden. Der Wirkungsquerschnitt ist für $E_e < E_B$ gleich null und steigt ab $E_e = E_B$ zu höheren E_e hin an, bis ein Maximum erreicht wird, daß bei der etwa zwei- bis drei fachen Bindungsenergie liegt. Für noch höhere E_e fällt der Wirkungsquerschnitt flach ab und geht für $E_e \rightarrow \infty$ gegen null.

Weiterhin kann Ionisation auch durch Absorption eines Photons ausreichender Energie erfolgen. In diesem Fall spricht man von Photoionisation [107, 108].



Erfolgt die Ionisation direkt, so ist der stattfindende Prozess nicht-resonant. Bei Ionisation über einen autoionisierenden Zwischenzustand ist der Prozess resonant.

Rekombinationsprozesse

Ein positiv geladenes Ion kann ein freies Elektron einfangen und damit seine Ladung um eins erniedrigen. Ein solcher Prozess ist die Zeitumkehr eines der oben beschriebenen Ionisationsprozesse.

Wird ein Elektron unter Aussendung eines Photons eingefangen, dann ist dies die Umkehrung der Photoionisation. Der nicht-resonante Prozess

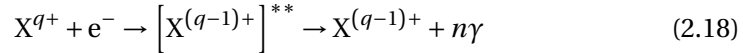


wird als radiative Rekombination bezeichnet. Die Energie des abgestrahlten Photons ist die Summe aus der kinetischen Energie des Elektrons und der Bindungsenergie des Elektrons nach dem Einfang. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess ist nach Kim und Pratt [71, 108] näherungsweise gegeben als

$$\sigma_{RR} = \frac{8\pi\alpha^3 Z_{\text{eff}}^4}{\sqrt{27}n^3 E_e E_\gamma}. \quad (2.17)$$

Es ist wieder E_e die kinetische Energie des Elektrons. Außerdem sind E_γ die Energie des ausgesandten Photons und n die Hauptquantenzahl des Niveaus, in dem sich das Elektron nach dem Einfang befindet. Die Größe Z_{eff} ist die effektive Kernladungszahl. Diese ist wegen der teilweisen Abschirmung der Kernladung durch die Elektronenhülle kleiner als Z .

Die Zeitumkehr der resonanten Photoionisation über einen Auger-Zerfall wird als dielektronische Rekombination bezeichnet [10, 12, 108].



Die Resonanzbedingung für diesen Prozess ist, daß die Summe aus der kinetischen Energie des Elektrons und der Bindungsenergie des Niveaus, in das es eingefangen wird, gleich der Differenz der Energien des angeregten Zwischenzustands und des Grundzustands ist.

2.2 Neon-artiges Eisen

Eisen ist eines der häufigsten Elemente im Universum und tritt deshalb in Spektren vieler astrophysikalischer Objekte auf [69]. Neben den bereits in der Einleitung

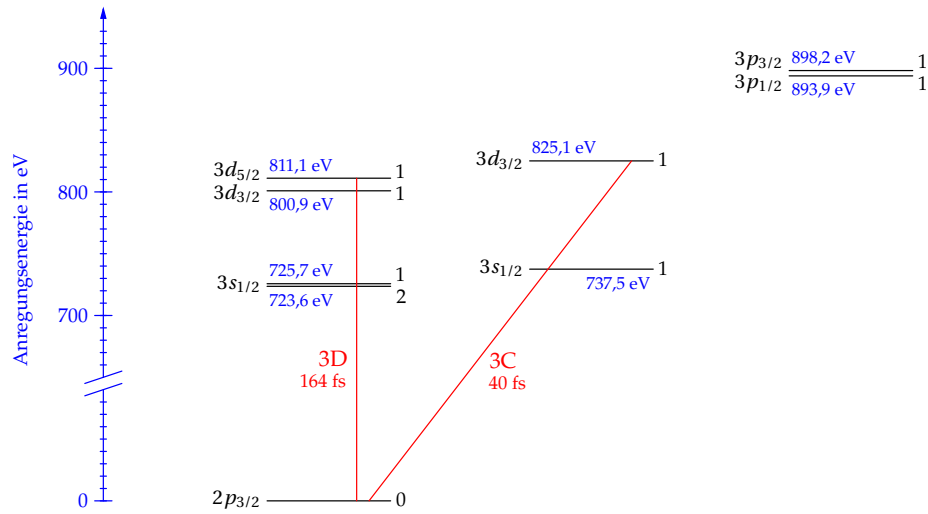


Abbildung 2.2. Ein Grotrian-Diagramm von Fe¹⁶⁺. In blau sind die Energien der Niveaus relativ zum Grundzustand angegeben. Die Übergänge 3C und 3D sind in rot eingezeichnet. Zusätzlich sind die gerechneten Lebensdauern beider angeregter Niveaus angegeben. Alle Werte stammen von Clementson [24].

erwähnten Sternatmosphären zählen dazu zum Beispiel auch aktive galaktische Kerne (engl. Active Galactic Nuclei, AGN), die kompakten und hellen Zentren der sogenannten Seyfert-Galaxien [36, 101]. Durch ein verhältnismäßig hohes Z , und die damit verbundenen hohen Übergangswahrscheinlichkeiten sowie Ionisationspotentiale, spielen Ionen von Eisen eine dominante Rolle in den Spektren heißer kosmischer Objekte. Mit den Weltraumteleskopen Chandra und XMM-Newton war es erstmals möglich, Spektren im weichen Röntgen-Bereich um 1 keV aufzunehmen, in denen einzelne Spektrallinien aufgelöst werden konnten. Es wurden zur Interpretation verlässliche Modellspektren notwendig. Große Aufmerksamkeit kam dabei Neon-artigem Eisen Fe¹⁶⁺ zu, daß eine Reihe prominenter Spektrallinien in diesem Spektralbereich besitzt (siehe auch Abbildung 1.2).

Als Neon-artiges Ion besitzt Fe¹⁶⁺ eine geschlossene L-Schale. Zur Ionisation aus dem Grundzustand ($2s^2 2p^6$) in den nächst höheren Ladungszustand Fe¹⁷⁺ müssen 1263 eV aufgebracht werden [114]. In Abbildung 2.2 ist ein Grotrian-Diagramm von Fe¹⁶⁺ gezeigt. Darin enthalten sind die von Clementson [24] gerechneten Energien, sowie die Lebensdauern der zu 3C und 3D gehörigen angeregten Niveaus. Aus den selben Rechnungen können auch Oszillatorstärken, sowie Einstein-Koeffizienten gewonnen werden. Für 3C ist demnach $f_{ij}=2,56$, $A_{ji}=2,52 \cdot 10^{13}$ Hz, $B_{ij}=1,54 \cdot 10^{19}$ m³s⁻²J⁻¹, und für 3D $f_{ij}=0,641$, $A_{ji}=6,10 \cdot 10^{12}$ Hz, $B_{ij}=3,92 \cdot 10^{18}$ m³s⁻²J⁻¹. Da gerade diese Größen Gegenstand der in der vorliegenden Arbeit zu untersuchenden Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment sind, können sie nur zur groben Orientierung dienen.

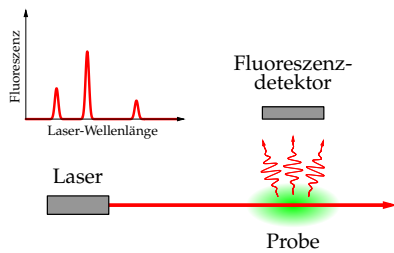


Abbildung 2.3. Das grundlegende Prinzip der Laserspektroskopie. Eine Probe wird von einem schmalbandigen durchstimmbaren Laser beleuchtet und auftretende Fluoreszenz wird detektiert. Wird nun die Wellenlänge des Laserlichts kontinuierlich über einen gegebenen Bereich verfahren, dann tritt nur dann Fluoreszenz auf, wenn die Laser-Wellenlänge zur Anregung eines Übergangs in der Probe geeignet ist.

2.3 Laserspektroskopie

In der klassischen Spektroskopie wird das von einer zu untersuchenden Probe kommende Licht mit Hilfe eines dispersiven Elements, wie etwa einem Prisma oder einem Gitter, der Wellenlänge nach aufgespalten. Das so entstehende Spektrum wird dann aufgezeichnet. Dies kann mit dem bloßen Auge, chemisch mit Hilfe von Fotoplatten oder elektronisch etwa mit Halbleiterdetektoren erfolgen. Die Anregung der dem Spektrum zugrunde liegenden Übergänge erfolgt dabei in aller Regel durch Stoßprozesse, wie zum Beispiel durch thermische Elektronen beim starken Aufheizen der Probe. Solche Prozesse regen eine Vielzahl Übergänge gleichzeitig an, wodurch eine große Zahl Linien im beobachteten Spektrum auftreten. Das erreichbare spektrale Auflösungsvermögen in einem solchen Aufbau ist einerseits bestimmt durch das verwendete dispersive Element und dadurch technisch limitiert. Andererseits führt auch die undifferenzierte Anregung zu einem Auflösungsverlust durch Stoß- und Doppler-Verbreiterung der Spektrallinien.

In der Laserspektroskopie wird zur Anregung von Übergängen in der Probe ein durchstimmbarer Laser eingesetzt. Das Prinzip ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Kann das vom Laser kommende Licht keinen Übergang anregen, so ist die Probe für dieses Licht transparent. Wird jedoch die Wellenlänge des Lasers verändert und die Anregung von Übergängen wird möglich, so werden diese Übergänge durch den Laser angeregt. Die sich anschließende Abregung kann nun durch Aussendung von Photonen erfolgen und diese Fluoreszenz kann mit Hilfe eines Detektors gemessen werden. Um ein Spektrum zu gewinnen wird die Wellenlänge des Lasers über den gewünschten Bereich hinweg abgetastet und das vom Detektor gemessene Fluoreszenzsignal wird in Abhängigkeit von der Wellenlänge aufgezeichnet.

Das erreichbare Auflösungsvermögen ist in diesem Fall bestimmt durch die Bandbreite des verwendeten Lasers. Es ist also im Gegensatz zur klassischen Spektroskopie nicht erforderlich, die Wellenlänge der Fluoreszenzphotonen zu messen, sondern es ist nur notwendig eine möglichst gute Monochromatizität des Lasers zu bewerkstelligen. Insbesondere benötigt der Fluoreszenzdetektor keinerlei spektrales Auflösungsvermögen, sondern muss lediglich die Ankunft eines Photons erfassen können. Das gemessene Signal ist die Anzahl detektierter Photonen. Dadurch sind laserspektroskopische Experimente Zählexperimente.

Der für die Laserspektroskopie grundlegende Prozess, die gezielte signifikante Änderung einer Zustandsbesetzung durch Bestrahlung, wurde 1950 erstmals von Alfred Kastler vorgeschlagen [25, 70]. Dieser erhielt dafür 1966 den Nobel-Preis. Ebenfalls mit diesem Preis ausgezeichnet wurden 1981 Nicolaas Bloembergen und Arthur Leonard Schawlow zusammen mit Kai Manne Börje Siegbahn. Nach der Erfindung des Lasers wandten sie diese neue Lichtquelle wegen ihrer im Vergleich zu konventionellen Lichtquellen sehr hohen Photonenflüsse für die spektroskopische Untersuchung nicht-linearer optischer Phänomene [17]. Es folgten viele weitere Verbesserungen des einfachen grundlegenden Prinzips, wie zum Beispiel die Verwendung einzelner gefangener Atome, und laserspektroskopische Methoden erlaubten die Bestimmung von absoluten Resonanzwellenlängen mit einer bis dahin unerreichten Genauigkeit [115]. Die Einführung des sogenannten Frequenzkamms machte ab 1998 noch genauere Messungen möglich [55, 62, 115]. Ein weiterer Nobelpreis ging für diese neuesten Entwicklungen an John Hall und Theodor Hänsch, zusammen mit Roy Glauber.

2.4 Freie-Elektronen-Laser

Die Techniken der Laserspektroskopie konnten bisher nicht bei Wellenlängen im Röntgen-Bereich angewandt werden, da keine geeigneten Laser existierten. Solche müssen einerseits einen vergleichsweise hohen Photonenfluss und andererseits eine hohe Monochromatizität aufweisen. Die Funktionsweise eines optischen Lasers lässt sich für Röntgen-Strahlung nicht realisieren.

Röntgen-Strahlen wurden, seit ihrer Entdeckung im Jahr 1895 durch Wilhelm Conrad Röntgen, mit Hilfe von Vakuumröhren erzeugt, bei denen Elektronen auf eine Metalloberfläche geschossen werden [80]. Weitaus höhere Intensitäten und Photonenenergien wurden mit der Entwicklung von Synchrotron-Strahlungsquellen zugänglich. In einer Weiterentwicklung der Prinzipien, auf denen Synchrotrone beruhen, entstand in den 1970er-Jahren das Prinzip des Freie-Elektronen-Lasers (engl. Free-Electron Laser, FEL) [80, 81]. Seit 2005 steht bei DESY (Deutsches Elektronen-Synchrotron) in Hamburg FLASH (engl. Free-Electron Laser in Hamburg) für den Nutzerbetrieb zur Verfügung, der mit bis hinunter zu 41 Å Wellenlänge einige Jahre die kurzwelligste von einem FEL erzeugte Strahlung zur Verfügung stellte. Echte Röntgenstrahlung durch einen FEL wurde 2009 erstmals von der Linac Coherent Light Source (LCLS) in Stanford produziert [39].

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen für die Funktionsweise eines FELs diskutiert. Dabei wird besonderer Wert gelegt auf die für die folgenden Teile der vorliegenden Arbeit wichtigen Aspekte. Weitaus detailliertere Darstellungen finden sich in der Literatur, zum Beispiel in Lindblad *et al.* [80] oder in Margaritondo und Rebernik [84].

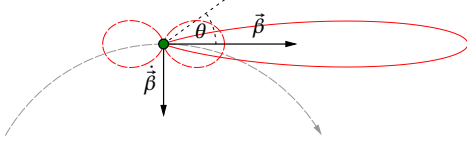


Abbildung 2.4. Eine senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung beschleunigte Ladung strahlt Synchrotronstrahlung ab. Gezeigt ist die Winkelverteilung dieser Strahlung für $\beta = 0$ (rot gestrichelt) und $\beta = 0,9$ (rot durchgezogen). Beide Verteilungen sind rotationssymmetrisch um den Vektor $\vec{\beta}$. Die Verteilung für $\beta = 0,9$ ist um einen Faktor 200 verkleinert dargestellt.

Synchrotronstrahlung

Im Ruhesystem einer sich mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegend beschleunigten Ladung q ist die pro Raumwinkelement $d\Omega$ abgegebene Strahlungsleistung gegeben als [13, 43, 80]

$$dP = \frac{q^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \cdot \frac{\left| \vec{e}_r \times \left[(\vec{e}_r - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}} \right] \right|^2}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{e}_r)^5} \cdot d\Omega. \quad (2.19)$$

Dabei sind $\vec{\beta}$ der auf die Lichtgeschwindigkeit normierte Geschwindigkeitsvektor \vec{v}/c und \vec{e}_r der Einheitsvektor, der in Richtung des Beobachters zeigt.

Die Ladung bewege sich nun in x -Richtung und werde in y -Richtung beschleunigt.

$$\vec{\beta} = \beta \vec{e}_x \quad (2.20a)$$

$$\dot{\vec{\beta}} = \dot{\beta} \vec{e}_y \quad (2.20b)$$

Die Abstrahlung erfolgt unter diesen Bedingungen rotationssymmetrisch um die x -Achse, wodurch die folgenden Betrachtungen auf die x - y -Ebene beschränkt werden können und die Beobachterrichtung allein durch den Winkel θ beschrieben werden kann.

$$\vec{e}_r = \cos\theta \vec{e}_x + \sin\theta \vec{e}_y \quad (2.21)$$

Aus Gleichung 2.19 folgt dann

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \cdot \dot{\beta}^2 \cdot \frac{(\cos\theta - \beta)^2}{(1 - \beta \cos\theta)^5} \quad (2.22)$$

für die Winkelverteilung der von einer senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung beschleunigten Ladung.

Für eine sich relativistisch bewegend Ladung ist die abgegebene Strahlung stark vorwärts gerichtet. Dies ist in Abbildung 2.4 illustriert. Auf diese Weise wird Strahlung unter anderem in Synchrotronen erzeugt, in denen sich geladene Teilchen auf einer Kreisbahn bewegen. Deshalb wird sie als Synchrotronstrahlung bezeichnet.

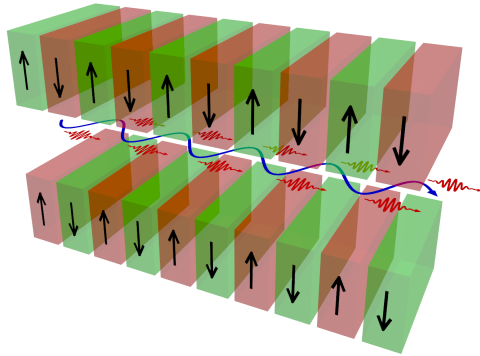


Abbildung 2.5. Ein Undulator ist eine magnetische Struktur, in der sich die Magnetfeldrichtung periodisch umkehrt. Geladene Teilchen bewegen sich in einer solchen Struktur auf einer periodischen Bahn, auf der sie senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung beschleunigt werden. Dadurch wird über die gesamte Länge des Undulators hinweg Synchrotronstrahlung erzeugt.

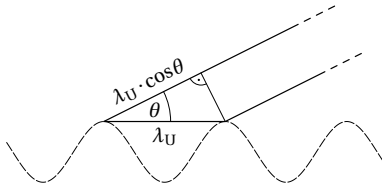


Abbildung 2.6. Strahlung, die in zwei aufeinander folgenden Perioden parallel ausgesendet wird, kann im Unendlichen konstruktiv interferieren, wenn der Gangunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Strahlungswellenlänge ist.

Undulatoren

Um die Strahlungsausbeute durch Synchrotronstrahlung zu erhöhen, können Ladungsträger anstelle einer Kreisbahn auch auf eine periodisch oszillierende Bahn wie in Abbildung 2.5 geschickt werden. Dieserart wird ein einzelner Ladungsträger mehrfach zur Strahlungserzeugung eingesetzt. Eine solche periodische Bahn wird realisiert durch ein periodisches Magnetfeld senkrecht zu der Ebene, in der sich der Ladungsträger bewegt. Ein solches Feld kann durch eine periodische Anordnung von Permanent- oder Elektromagneten erzeugt werden und wird beschrieben durch die Periodenlänge λ_U , die Anzahl Perioden N_U und die maximale Feldstärke B_U .

Bewegt sich die Ladung mit einer mittleren Geschwindigkeit $\langle v \rangle$, dann legt sie die Strecke λ_U in der Zeit

$$\tau = \frac{\lambda_U}{\langle v \rangle} \quad (2.23)$$

zurück. In dieser Zeitspanne legt emittiertes Licht eine Strecke $c\tau$ zurück. Wird nun Licht im Feldmaximum einer Periode unter einem Winkel θ bezüglich der Bewegungsrichtung abgestrahlt, dann wird sie der eine Periode später in die selbe Richtung abgegebenen Strahlung um eine Strecke Δ voraus sein. Dieser Fall ist in Abbildung 2.6 illustriert. Ist die Wellenlänge des Lichts λ_γ , dann tritt in großem Abstand vom ihrem Entstehungsort konstruktive Interferenz auf, wenn der Gang-

unterschied Δ ein ganzzahliges Vielfaches von λ_γ ist.

$$\Delta = c\tau - \lambda_U \cdot \cos(\theta) \quad (2.24a)$$

$$= \lambda_U \cdot \left(\frac{c}{\langle v \rangle} - \cos(\theta) \right) \quad (2.24b)$$

$$= k \cdot \lambda_\gamma \quad (2.24c)$$

Nähert man den Feldverlauf durch eine Sinus-Funktion an, so gilt für die mittlere Geschwindigkeit einer sich relativistisch bewegenden Ladung über eine Feldperiode nach Lindblad *et al.* [80] näherungsweise

$$\langle v \rangle \approx c \cdot \left[1 - \frac{1}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{1}{2}K^2 \right) \right]. \quad (2.25)$$

Dabei ist $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ der Lorentz-Faktor. Die einheitenlose Größe K wird als Undulator-Parameter bezeichnet, ist proportional zur Magnetfeldamplitude B_U im Undulator, und ist nach Lindblad *et al.* [80] für Elektronen gegeben als

$$K = \frac{\lambda_U \cdot e \cdot B_U}{2\pi \cdot m_e \cdot c}. \quad (2.26)$$

Durch ein magnetisches Feld wird der Betrag der Geschwindigkeit einer Ladung nicht verändert, wohl aber die Richtung des Geschwindigkeitsvektors. Durch ihre Bewegung auf einer periodisch oszillierenden Bahn wird die von einer Ladung zurückgelegte Strecke gegenüber einer geradlinigen Bewegung verlängert. Die Größe dieser Verlängerung hängt von den herrschenden Feldern ab und wird beschrieben durch K . Durch Taylor-Entwicklung von $1/(1-x)$ um $x=0$ mit $x = (1 + \frac{1}{2}K^2)/(2\gamma^2)$ folgt aus Gleichung 2.24c für $k=1$ und $\theta=0$

$$\lambda_\gamma \approx \frac{\lambda_U}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{1}{2}K^2 \right). \quad (2.27)$$

Ist diese Bedingung nicht erfüllt, dann findet keine konstruktive Interferenz statt und die in einem schmalen Wellenlängenbereich um λ_γ in einer gegebenen Richtung abgegebene Strahlungsleistung ist proportional zur Periodenzahl N_U . In einem solchen Fall nennt man die verwendete magnetische Struktur Wiggler. Ist die Bedingung hingegen erfüllt und konstruktive Interferenz findet statt, dann ist die über alle Perioden in die selbe Richtung mit der Wellenlänge λ_γ abgegebene Strahlungsleistung proportional zu N_U^2 und man spricht von einem Undulator.

Microbunching

Typischerweise werden in Undulatoren Elektronen als Ladungsträger eingesetzt. Diese werden dabei in Paketen (engl. Bunches) in den Undulator geschickt. Diese

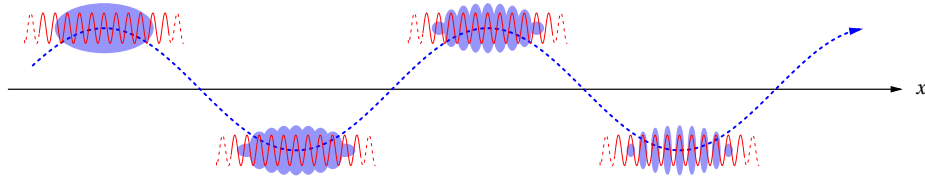


Abbildung 2.7. Auf ihrer Bahn durch den Undulator (blau gestrichelt) wechselwirken die Elektronen in den Elektronenpaketen (blau) mit dem erzeugten Strahlungsfeld (rot). Durch den dabei stattfindenden Energietransfer bildet sich eine Substruktur aus Mikropaketen aus.

Pakete besitzen eine räumliche Ausdehnung entlang der Flugrichtung und bewegen sich mit relativistischen Geschwindigkeiten. Deshalb können die Elektronen in einem Paket mit dem von diesem Paket erzeugten Strahlungsfeld wechselwirken. So wird Energie zwischen Elektronen und Strahlungsfeld ausgetauscht. Wird von Elektronen Strahlung mit einer Wellenlänge λ_γ in Flugrichtung des Elektronenpakets abgegeben, dann wird die senkrecht zur Abstrahlrichtung stehende elektrische Feldkomponente dieser Strahlung eine räumliche Periode von λ_γ besitzen. Nach einer Zeit t hat die Strahlung eine Strecke ct zurückgelegt. In der selben Zeit legt das Elektronenpaket eine Strecke $\langle v \rangle t$ zurück. Gleichzeitig besitzt die Geschwindigkeit der Elektronen im Paket eine oszillierende Komponente senkrecht zur Bewegungsrichtung. Diese Geschwindigkeitskomponente und das elektrische Feld sind parallel. Besitzen sie zu einem gegebenen Zeitpunkt die gleiche Richtung, dann werden die Elektronen am entsprechenden Ort beschleunigt, erhalten also Energie aus dem Strahlungsfeld. Zeigen die Felder in entgegengesetzte Richtungen, dann werden die Elektronen abgebremst. Zwischen zwei Feldmaxima nimmt die Feldamplitude ab und wird zu null, bevor sie wieder anwächst. In dieser Zeit ist das Strahlungsfeld entsprechend schwächer an die Elektronen gekoppelt und kann sich deshalb mit nur schwacher Wechselwirkung durch das Elektronenpaket bewegen. Es kann nun geschehen, daß sich Elektronen, die in einem Feldmaximum Energie gewonnen haben, gerade im nächsten Feldmaximum, das sie passieren, erneut die passende Geschwindigkeit besitzen. Dazu muss das Strahlungsfeld dem Elektronenpaket immer genau eine Undulatorperiode pro Periode voraus sein.

$$ct = \lambda_U + \lambda_\gamma \quad (2.28)$$

In diesem Fall besitzen alle Orte im Elektronenpaket eine feste Phasenbeziehung zum elektrischen Feld. Elektronen, deren Oszillationsbewegung in Phase mit dem elektrischen Feld stattfindet, erhalten effektiv Energie, während solche außer Phase effektiv Energie verlieren. Dadurch bildet sich innerhalb eines Pakets eine Substruktur von Mikropaketen (engl. Microbunches) aus (siehe Abbildung 2.7). Gleichung 2.28 ist identisch zu Gleichung 2.24c. Deshalb ist die Bedingung für die

Bildung von Mikropaketen durch das zuvor besprochene spontaner Undulatorstrahlungsfeld erfüllt. Der Abstand zweier Mikropakete ist dabei gleich der Periode λ_γ des Strahlungsfeldes.

Alle Elektronen innerhalb eines Mikropakets bewegen sich kollektiv und wirken so als eine einzige Ladung. Wegen der Interferenzbedingung (Gleichung 2.24c) ist der Phasenzusammenhang zwischen Elektronenbewegung und Strahlungsfeld an einem Ort im Ruhesystem des Elektronenpakets für alle Undulatorperioden konstant. Hierdurch kommt es über die gesamte Länge des Undulators hinweg zu einem Transfer von Energie vom Elektronenpaket in das Strahlungsfeld.

Verstärkung und SASE

Wie oben beschrieben wechselwirken in einem Undulator Elektronen und Strahlungsfeld. Außerdem wechselwirkt das erzeugte Strahlungsfeld mit dem ohnehin vorhandenen Feld im Undulator. Dies führt zu einem Anwachsen der Amplitude des Strahlungsfeldes über die Länge des Undulators hinweg. Es stellt sich heraus, daß sie exponentiell wächst [80]. Die Länge über die die Amplitude um einen Faktor e wächst nennt man Verstärkungslänge L_V . Nach Margaritondo und Rebernik [84] kann abgeschätzt werden, daß diese Verstärkung nicht unbegrenzt erfolgen kann, sondern nach $4\pi\sqrt{3} \approx 22$ Verstärkungslängen zum Erliegen kommt.

Nicht alle durch die Beschleunigung der Elektronen erzeugte Strahlung besitzt die selbe Wellenlänge und die Bedingungen für die beschriebenen Verstärkungsmechanismen sind nicht für alle Wellenlängen erfüllt. In den ersten Perioden eines Undulators tritt spontane Emission von Synchrotronstrahlung mit einer breiten spektralen Verteilung auf. Die Wellenlängen sind stochastisch verteilt. Die spektralen Anteile in diesem Rauschen, die zufällig die Verstärkungsbedingungen erfüllen, werden über die Gesamtlänge des Undulators verstärkt, wohingegen der Rest unterdrückt bleibt. Findet die Strahlungserzeugung mit Elektronen in einem Undulator nach diesem SASE (engl. Self-Amplified Spontaneous Emission) genannten Prinzip statt, so spricht man von einem Freie-Elektronen-Laser. Die Bezeichnung als Laser stammt unter anderem von der Ähnlichkeit des SASE-Prozesses zur selbstverstärkenden spontanen Emission in einem konventionellen Laser, sowie von den laserartigen Eigenschaften der erzeugten Strahlung.

2.5 Elektronenstrahlionenfallen

In einer Elektronenstrahlionenfalle (engl. Electron Beam Ion Trap, EBIT) wird ein Elektronenstrahl dazu verwendet, aus neutralen Atomen oder Ionen niedriger Ladungszustände durch Elektronenstoßionisation (siehe Abschnitt 2.1, Unterabschnitt „Ionisationsprozesse“) schrittweise Ionen höherer Ladungszustände zu erzeugen [30]. Im Prinzip können auf diese Weise positive Ionen aller Elemente

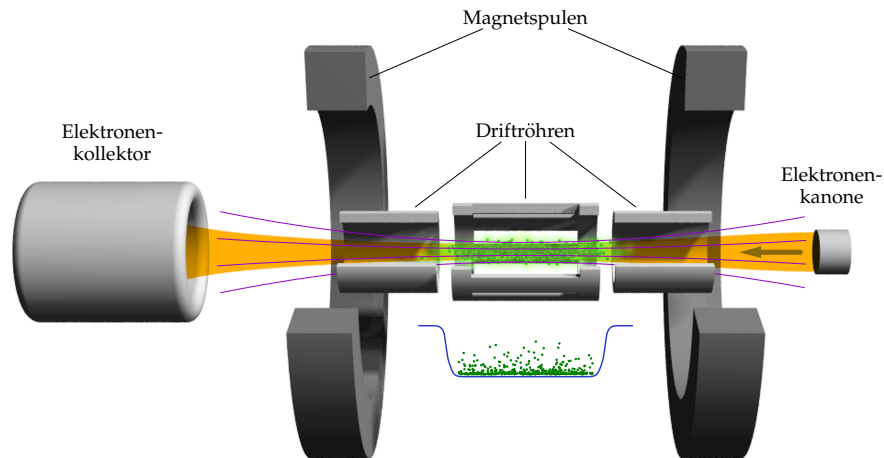


Abbildung 2.8. Gezeigt ist der schematische Aufbau einer EBIT. Die Elektronen bewegen sich wie vom Pfeil angezeigt von der Elektronenkanone rechts zum Elektronenkollektor links. Der Elektronenstrahl wird dabei von einem starken Magnetfeld, erzeugt durch das Magnetspulen-Paar, komprimiert. Der Verlauf der magnetischen Feldlinien ist violett angedeutet. Die erzeugten Ionen (grün) werden durch die Raumladung des Elektronenstrahls und durch das Magnetfeld radial gefangen. Um sie am Verlassen der Falle in axialer Richtung zu hindern werden die an das Fallenzentrum angrenzenden Driftröhren auf ein im Vergleich zu diesem positives Potential gelegt. Ein solcher Potentialverlauf ist unterhalb der Driftröhren angedeutet.

und Ladungszustände erzeugt werden [85]. Das zugrunde liegende Prinzip wurde 1969 erstmals von Donets *et al.* mit einer sogenannten Elektronenstrahlionenquelle (engl. Electron Beam Ion Source, EBIS) demonstriert [35]. Diese wurde von Levine *et al.* am Lawrence Livermore National Laboratory zur EBIT weiterentwickelt [79], in der nicht nur die Erzeugung hochgeladener Ionen möglich ist, sondern auch deren Speicherung.

Der Aufbau einer EBIT ist in Abbildung 2.8 dargestellt. Elektronen werden in einer Elektronenkanone erzeugt und zum Fallenzentrum hin beschleunigt. Ein Paar Magnetspulen erzeugt ein starkes Magnetfeld parallel zur Strahlachse. Da das magnetische Feld am Freisetzungsort der Elektronen schwächer ist als im Fallenzentrum, die Elektronen jedoch an die Feldlinien gebunden sind, wird der sich ausbildende Elektronenstrahl stark komprimiert. Nach der Durchquerung der Fallenmitte weitet sich der Elektronenstrahl dementsprechend wieder auf und kann im sogenannten Kollektor wieder aufgefangen werden.

Der Elektronenstrahl

Ein an einer thermischen Kathode erzeugter und durch ein Magnetfeld komprimierter Elektronenstrahl, wie er in einer EBIT zum Einsatz kommt, lässt sich mit der Theorie von Herrmann [61] beschreiben. Besitzt die Kathode einen Radius r_K und eine Temperatur T_K , und ist das Magnetfeld am betrachteten Ort homogen mit

einer Feldstärke B , dann ist der sich einstellende zeitlich gemittelte Strahlradius, genannt Herrmann-Radius, gleich

$$r_H = \sqrt{\frac{m_e I_e}{\pi \epsilon_0 e \nu B^2} + \sqrt{\left(\frac{m_e I_e}{\pi \epsilon_0 e \nu B^2}\right)^2 + \frac{8k T_K m_e}{e^2 B^2} r_K^2 + \frac{B_K^2}{B^2} r_K^4}}. \quad (2.29)$$

Dabei sind B_K das an der Kathode herrschende Magnetfeld und ν die Geschwindigkeit der Elektronen. Für Elektronen, die über eine Potentialdifferenz U beschleunigt werden ist

$$\nu = c \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{m_e c^2}{m_e c^2 + eU}\right)^2}. \quad (2.30)$$

Das elektrische Potential

Der Elektronenstrahl besitzt eine negative elektrische Ladung. Die durch Stoß mit den Elektronen erzeugten Ionen sind positiv geladen und sind durch die elektrische Anziehung des Strahls in radialer Richtung gebunden. Das elektrische Potential Φ des Elektronenstrahls ist gegeben als Lösung der Poisson-Gleichung [32]

$$\vec{\nabla}^2 \Phi = -\frac{\rho_e}{\epsilon_0}. \quad (2.31)$$

Dabei ist ρ_e die lokale Ladungsdichte. Für einen angenommenen unendlich langen zylindrischen Elektronenstrahl konstanter Dichte und mit einem Radius r_H ist

$$\rho_e = \frac{I_e}{\pi r_H^2 \nu}, \quad (2.32)$$

wenn I_e der Elektronenstrom ist. Innerhalb einer angenommenen unendlich langen um den Elektronenstrahl konzentrisch liegenden Driftröhre reduziert sich Gleichung 2.31 zu

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \Phi \right) = -\frac{\rho_e}{\epsilon_0} \quad (2.33)$$

und hängt nur noch vom Radius r ab. Die Randbedingung zur Lösung dieser Gleichung ist gegeben durch den Driftröhrenradius r_D und das auf den Driftröhre herrschende Potential U_D . Unter den so vereinfachten Bedingungen ist eine analytische Lösung möglich. Es ergibt sich

$$\Phi(r) = \begin{cases} \Phi_D + \Phi_0 \cdot \left[\left(\frac{r}{r_H} \right)^2 + 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) - 1 \right] & r \leq r_H \\ \Phi_D + \Phi_0 \cdot 2 \ln \left(\frac{r}{r_D} \right) & r > r_H \end{cases}. \quad (2.34)$$

Die Größe Φ_0 hängt ab von I_e und ν .

$$\Phi_0 = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \cdot \frac{I_e}{\nu} \quad (2.35)$$

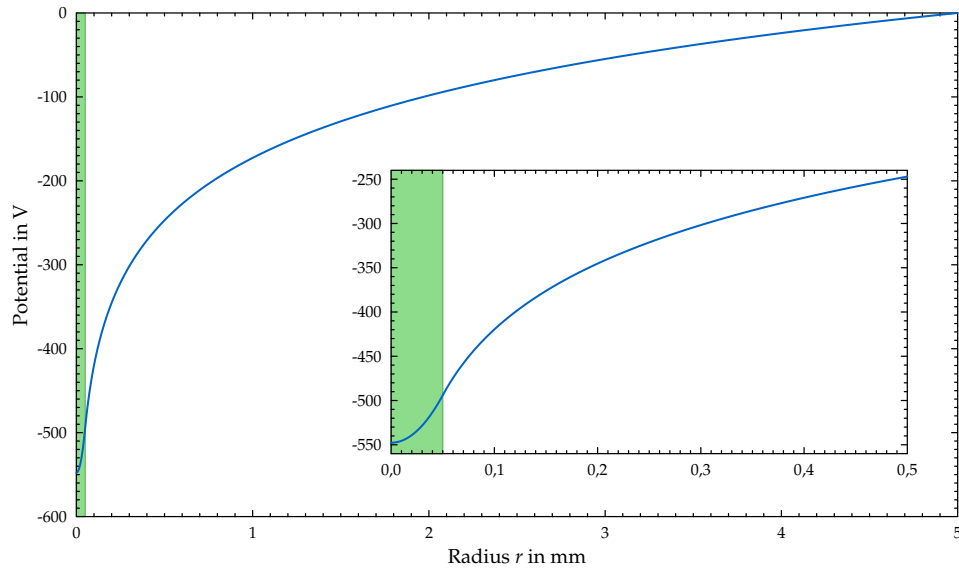


Abbildung 2.9. Gezeigt ist ein typischer radialer elektrischer Potentialverlauf in der zentralen Driftröhre einer EBIT. Es wurden ein Driftröhrenradius von 5 mm und ein Strahlradius von 50 μm bei einem Strahlstrom von 100 mA angenommen. Letzterer ist durch ein grünes Band angedeutet. Das äußere Schaubild zeigt den gesamten Potentialverlauf bis zur Driftröhre, das innere einen Ausschnitt um den Elektronenstrahl. Es wurde ein Elektronenstrahl konstanter Ladungsdichte mit über eine Potentialdifferenz von 800 V beschleunigten Elektronen angenommen. Außerdem wurde das Driftröhrenpotential gleich null gesetzt.

Ein solcher radialer Potentialverlauf ist in Abbildung 2.9 gezeigt.

In einer realen EBIT sind die Driftröhren nicht unendlich lang, so daß an den Röhrenübergängen Randeffekte auftreten. Um diese zu berücksichtigen, muss Gleichung 2.31 unter Beachtung der tatsächlichen Fallengeometrie und der herrschenden Potentiale numerisch gelöst werden.

Die kinetische Energie der Elektronen im Strahl ist bestimmt durch das am jeweiligen Ort herrschende elektrische Potential und die daraus folgende Potentialdifferenz U zum Erzeugungsort der Elektronen, für gewöhnlich eine geheizte Kathode. Befinden sich die Kathode auf einem Potential Φ_K und eine Driftröhre auf einem Potential Φ_D , jeweils gemessen gegen Erdpotential, dann ist für $r = 0$

$$U = \Phi_D - \Phi_K + \Phi_0 \cdot 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) + \Phi_I + \Phi_A . \quad (2.36)$$

Das durch den Elektronenstrahl selbst hervorgerufene Raumladungspotential ist $\Phi_0 \cdot 2 \ln (r_H / r_D)$. Da I_e ein negatives Vorzeichen besitzt, ist dieses potential negativ und reduziert U . Dem entgegen wirkt das Raumladungspotential Φ_I der gefangenen Ionen. Außerdem verschieben die zur Größe Φ_A zusammengefassten Austrittsarbeiten von Kathode und Driftröhrenmaterial U um einen materialabhängigen Betrag in einer Größenordnung von wenigen Volt.

Bewegung von Ionen in einer EBIT

Auf ein Ion mit der Ladung q und der Masse m wirkt in einer EBIT am Ort \vec{r} die durch das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{r})$ und das magnetische Feld $\vec{B}(\vec{r})$ hervorgerufene Lorentzkraft

$$m\ddot{\vec{r}} = q(\vec{E}(\vec{r}) + (\dot{\vec{r}} \times \vec{B}(\vec{r}))) . \quad (2.37)$$

In einer vereinfachten Darstellung der Situation in einer EBIT liegt das Magnetfeld parallel zur z -Achse und ist homogen. Außerdem sei das elektrische Feld rotationssymmetrisch um diese Achse und unabhängig von z .

$$\vec{B}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \quad (2.38a)$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = E(r) \cdot \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.38b)$$

Die Bewegung eines Ions entlang der z -Achse ist dann von der radialen Bewegung in der x - y -Ebene entkoppelt. Man erhält zwei gekoppelte Bewegungsgleichungen für die Radial- und die Winkelbewegung.

$$\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = \frac{q}{m} \cdot [E(r) + r\dot{\varphi}B] \quad (2.39a)$$

$$r\ddot{\varphi} + 2\dot{r}\dot{\varphi} = -\frac{q}{m} \dot{r}B \quad (2.39b)$$

Durch Übergang in ein mit konstanter Winkelgeschwindigkeit Ω rotierendes Bezugssystem, ausgedrückt durch

$$\dot{\varphi} = \dot{\tilde{\varphi}} + \Omega , \quad (2.40)$$

gelangt man wenn man

$$\Omega = -\frac{1}{2} \frac{q}{m} B \quad (2.41)$$

wählt zu

$$\ddot{\tilde{\varphi}} = -2\frac{\dot{r}}{r}\dot{\tilde{\varphi}} \quad (2.42a)$$

$$\ddot{r} = \frac{q}{m} \cdot E(r) + r \cdot [\dot{\tilde{\varphi}}^2 - \Omega^2] . \quad (2.42b)$$

In diesem Fall ist Ω die Larmor-Frequenz des Ions im Magnetfeld.

Da $E(r)$ in Gleichung 2.42b vom negativ geladenen Elektronenstrahl herrührt ist es negativ und positive Ionen werden gebunden. Aber auch ohne Elektronenstrahl verbleibt der bindende Term $(-r\Omega^2)$, der durch das Magnetfeld hervorgerufen wird. Ionen können also in einer EBIT selbst dann gefangen bleiben, wenn nach ihrer

Erzeugung der Elektronenstrahl ausgeschaltet wird. Dies nennt man magnetischen Fallen-Modus (engl. magnetic trapping mode) [5].

Für das in einer EBIT herrschende elektrische Potential (siehe vorhergehender Unterabschnitt) lassen sich die Bewegungsgleichungen nicht analytisch lösen. Qualitativ entsprechen diese Lösungen, die man numerisch erhalten kann, Rosettenbahnen um den Elektronenstrahl herum.

Prozesse in einer EBIT

Entgegen der Darstellung im vorhergehenden Abschnitt befindet sich jedoch in einer EBIT mehr als ein Ion und alle Ionen wechselwirken miteinander. Die Erzeugung von Ionen höherer Ladungszustände aus solchen niedrigerer Ladungszustände erfolgt in einer EBIT durch Elektronenstoßionisation. Dieser wirken Rekombinationsprozesse entgegen, die den Ladungszustand von Ionen verringern. Weiterhin treten Ladungsaustauschprozesse auf, bei denen Elektronen von einem niedergeladenen Ion zu einem hochgeladenen Ion überwechseln können. Außerdem können Ionen die Fallenregion verlassen und neue neutrale Atome von außen hinzu kommen.

Zwischen all diesen Prozessen stellt sich bei konstanten äußeren Bedingungen im Falleninneren ein Gleichgewicht ein, das zu einer Ladungszustandsverteilung führt, die bestimmt ist durch die beteiligten Wirkungsquerschnitte und die EBIT-Betriebsparameter, wie Elektronenstrahlstrom, Elektronenstrahlenergie, Fallenpotentiale und Zuflussrate neuer neutraler Atome. Durch Wahl der Betriebsparameter einer EBIT ist es bis zu einem gewissen Grad möglich, die Ladungszustandsverteilung in einer EBIT zu beeinflussen.

2.6 Laserspektroskopie an Ionen in einer EBIT

Für die laserspektroskopische Untersuchung hochgeladener Ionen ist eine EBIT in besonderer Weise geeignet, da die Photonen durch den Kollektor ins Fallenzentrum gelangen können, wodurch es möglich wird, den Photonenstrahl axial mit der gesamten Ionenwolke zum Überlapp zu bringen. Gleichzeitig besteht durch die geschlitzte zentrale Driftröhre ein guter Zugang zur Detektion der hervorgerufenen Fluoreszenz. Schematisch ist ein solcher Aufbau in Abbildung 2.10 gezeigt.

Bisherige Arbeiten zur Laserspektroskopie mit EBITs

Das Prinzip der Laserspektroskopie mit hochgeladenen Ionen an einer EBIT wurde erstmals mit der auch für die vorliegende Arbeit eingesetzten Heidelberger FLASH-EBIT, damals unter dem Namen Tesla-EBIT, am Freie-Elektronen-Laser FLASH in Hamburg demonstriert [40–42]. Dabei wurde der für laserspektroskopie

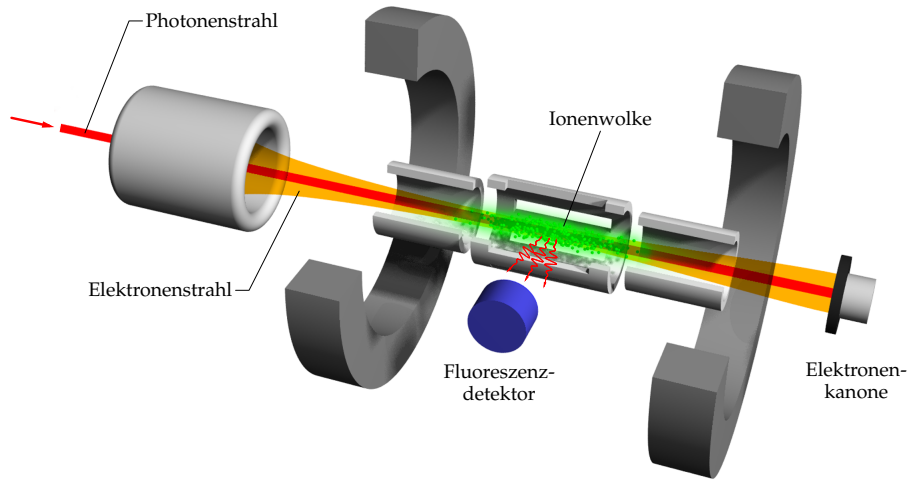


Abbildung 2.10. Dargestellt ist der prinzipielle Aufbau eines Laserspektroskopie-Experiments mit hochgeladenen Ionen in einer EBIT. Der Laser gelangt durch den Kollektor in die Fallenregion und wird axial mit der länglichen Ionenwolke zum Überlapp gebracht. Auftretende Fluoreszenz wird durch Sichtzugänge in der zentralen Driftröhre senkrecht zur Strahlrichtung detektiert.

zugängliche Wellenlängenbereich ins Ultraviolette und in den weichen Röntgenbereich ausgedehnt. An der ebenfalls am MPIK stationierten Heidelberg-EBIT und wiederum an der FLASH-EBIT wurden in der Folge laserspektroskopische Untersuchungen bei optischen Wellenlängen durchgeführt [82, 83, 102].

Winkelverteilung der Fluoreszenz

Üblicherweise ist das vom FEL kommende Röntgen-Licht linear polarisiert und die Fluoreszenz-Detektoren erfassen nur einen kleinen Teil des gesamten Raumwinkels, in den Photonen emittiert werden. Die Abstrahlung ist nicht isotrop, weshalb es notwendig ist, die Winkelverteilung dieser Abstrahlung zu kennen, um gemessene Zählraten mit vorhergesagten oder zuvor gemessenen Intensitätsverhältnissen vergleichen zu können.

Die Anregung eines Ions vom Grundzustand $|\alpha_g, J_g\rangle$ in einen angeregten Zustand $|\alpha_a, J_a\rangle$ durch Absorption eines Photons mit anschließender Abregung durch Aussendung eines Photons ist ein Zweistufenprozess

$$|\alpha_g, J_g\rangle + \gamma \rightarrow |\alpha_a, J_a\rangle^* \rightarrow |\alpha_g, J_g\rangle + \gamma. \quad (2.43)$$

Dabei wird der Grundzustand charakterisiert durch den Gesamtdrehimpuls J_g und zu α_g zusammengefasste weitere Quantenzahlen. Entsprechend wird der angeregte Zustand beschrieben durch J_a und α_a .

Ist das in z -Richtung einfallende Photon linear polarisiert und liegt dessen Polarisationsvektor in der x - z -Ebene, dann ist die Winkelverteilung der bei der

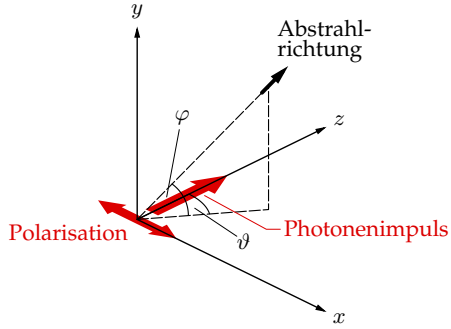


Abbildung 2.11. Gezeigt ist die Definition der Winkel ϑ und φ in den Gleichungen 2.44 bis 2.46 in Bezug auf den Photonenimpuls und die Polarisationsrichtung.

folgenden Abregung emittierten Photonen gegeben durch

$$W(\vartheta, \varphi) = \frac{\sigma}{4\pi} \left(1 + \sum_{k=1}^{2J_a} \sum_{q=-k}^k Y_{kq}(\vartheta, \varphi) \mathcal{A}_{kq}(\alpha_a, J_a) f_k(\alpha_a, J_a, \alpha_g, J_g) \right). \quad (2.44)$$

Diese Verteilung ist bestimmt durch den Ausrichtungsparameter \mathcal{A}_{kq} , der die Besetzung der magnetischen Unterzustände des angeregten Zustands beschreibt, und durch die Strukturfunktion f_k , die die elektronische Struktur des Ions und die Kopplung an das Strahlungsfeld beschreibt. Weiterhin ist σ der Wirkungsquerschnitt des gesamten Prozesses und Y_{kq} sind die Kugelflächenfunktionen. Die Lage der Winkel ϑ und φ im gewählten Koordinatensystem ist in Abbildung 2.11 dargestellt.

Im allgemeinen Fall ist die Berechnung von \mathcal{A}_{kq} und f_k aufwendig und oft nur numerisch möglich. Für Übergänge mit $J_g = 0$ jedoch vereinfacht sich die Behandlung des Problems und eine analytische Lösung wird möglich [112, 113]. Für die Übergänge 3C und 3D ist jeweils $J_a = 1$ und $J_g = 0$. Beide Übergänge besitzen deshalb gleiche Winkelverteilungen und Gleichung 2.44 vereinfacht sich zu

$$W(\vartheta, \varphi) \propto 1 + \frac{1}{3} \cos(2\vartheta) - \frac{2}{3} \cos(2\varphi) \sin^2 \vartheta. \quad (2.45)$$

Beachtenswert ist hierbei, daß diese Verteilung ausschließlich durch die Gesamtdrehimpulse bestimmt ist und nicht von weiteren Parametern der elektronischen Struktur der beteiligten Zustände abhängt [113]. Für den Vergleich der Intensitäten von 3C und 3D ist demzufolge die Winkelverteilung irrelevant, solange beide Übergänge unter dem selben Winkel beobachtet werden. Für Übergänge mit $J_a = 3/2$ und $J_g = 1/2$, wie zum Beispiel die Übergänge A und C des Natrium-artigen Eisens, erhält man auf ähnliche Weise [112]

$$W(\vartheta, \varphi) \propto 1 + \frac{3}{7} \cos(2\vartheta) - \frac{3}{7} \cos(2\varphi) \sin^2 \vartheta. \quad (2.46)$$

Beide Verteilungen sind in Abbildung 2.12 illustriert.

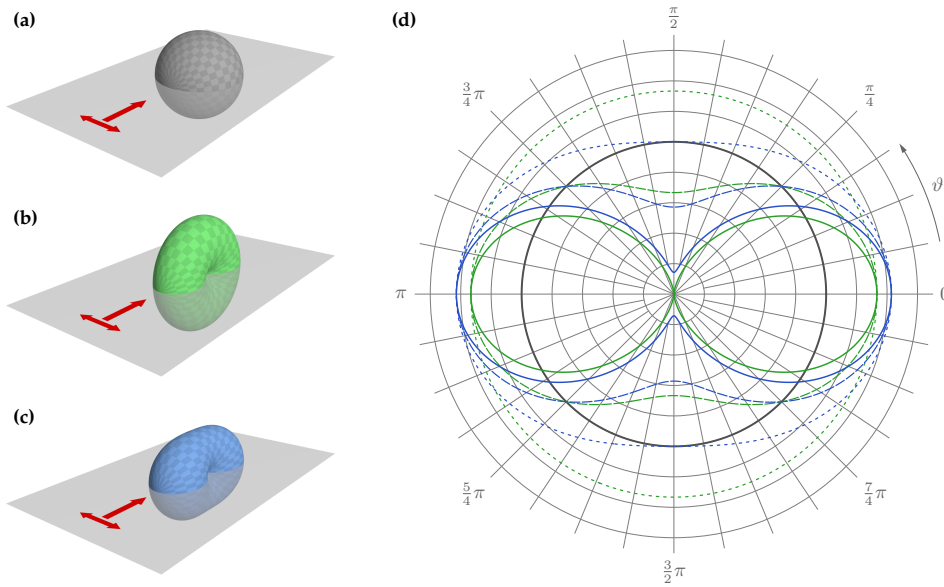


Abbildung 2.12. Gezeigt sind eine isotrope Abstrahlcharakteristik (a) und die Winkelverteilungen aus den Gleichungen 2.45 (b) und 2.46 (c). Die Einfallsrichtung des anregenden Photons und dessen Polarisation sind wie in Abbildung 2.11 definiert angedeutet. Außerdem dargestellt sind zweidimensionale Schnitte durch die dreidimensionalen Verteilungen (d). Gezeigt sind Schnitte in der durch Strahlachse und Polarisationsrichtung festgelegten Ebene (durchgezogene Linien), in einer zu dieser um die Strahlachse um 45° geneigten Ebene (gestrichelte Linien) und in einer senkrecht dazu stehenden Ebene (gepunktete Linien). Die Farben der Schnitte rechts entsprechen den Farben der Darstellungen links.

Kapitel 3

Experiment

Ziel der hier beschriebenen Arbeit war, die Methoden der Laserspektroskopie erstmals im Röntgen-Bereich anzuwenden. Dazu wurde eine EBIT als experimentelle Endstation an einem FEL verwendet. Der Photonenstrahl vom FEL wurde mit der länglichen Ionenwolke in der EBIT zum Überlapp gebracht und auftretende Fluoreszenz wurde als Funktion der FEL-Photonenenergie gemessen. Untersuchungsgegenstand waren hochgeladene Eisenionen in Ladungszuständen von Aluminium- bis Neon-artig. Insbesondere sollten die Übergänge 3C und 3D in Neon-artigem Eisen erstmals rein photonisch angeregt werden.

In diesem Kapitel wird der Aufbau des durchgeführten Experiments erläutert. Es werden der verwendete FEL und die verwendete EBIT eingehender beschrieben. Dabei wird insbesondere auf technische Anpassungen der EBIT eingegangen, die vorgenommen werden mussten, damit das Experiment durchgeführt werden konnte. Anschließend werden die eingesetzten Detektoren und Datenaufnahmesysteme erläutert.

Es wurden Messungen im Rahmen zweier Kampagnen in den Jahren 2011 und 2012 durchgeführt. Der grundlegende Aufbau des Experiments war dabei identisch. Bei Details, die sich bei den beiden Kampagnen unterschieden, wird an der entsprechenden Stelle im Text darauf hingewiesen.

3.1 Die Linac Coherent Light Source

Da Übergänge im Bereich von 800 bis 830 Elektronenvolt Gegenstand des Experiments sein sollten, war ein Röntgen-Laser notwendig, der Photonen in diesem Energiebereich bereitstellen konnte. Als weltweit erster echter Röntgen-FEL ging im Jahr 2009 die Linac Coherent Light Source (LCLS) am Stanford Linear Accelerator Laboratory (SLAC) im kalifornischen Menlo Park in Betrieb [39]. Die Anlage stellt Röntgen-Photonen mit einer Energie von 550 bis 10000 eV zur Verfügung [80]. Das Experiment konnte zum Zeitpunkt der Planung nur bei LCLS durchgeführt werden.

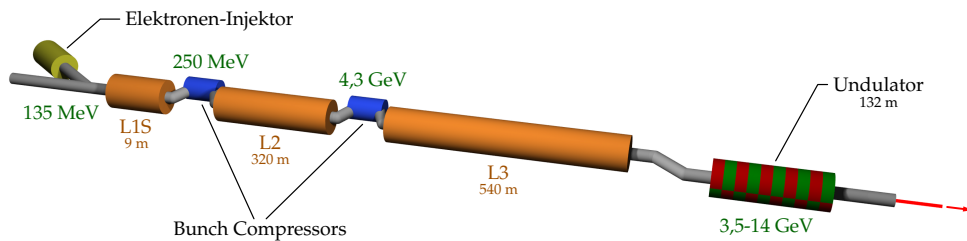


Abbildung 3.1. Bei LCLS werden Elektronenpakete im letzten Kilometer des ehemaligen 3-km-Linearbeschleunigers am SLAC beschleunigt und gelangen mit kinetischen Energien von einigen GeV in eine 132 m lange Undulatorstruktur.

Linearbeschleuniger

Bei LCLS werden Elektronenpakete mit einer Wiederholrate von 120 Hz an einer mit UV-Licht beschienenen Kupfer-Photokathode erzeugt und im umgebauten letzten Kilometer des ehemaligen SLAC 3-km-Linearbeschleunigers [97] auf 3,5 bis 15 GeV beschleunigt (siehe Abbildung 3.1). Damit beträgt der relativistische Lorentz-Faktor der Elektronen im Laborsystem $\gamma = 6850$ bis 27400. Typischerweise beträgt die Gesamtladung eines Elektronenpakets 0,25 nC. Die Beschleunigungsstrecke ist an zwei Stellen unterbrochen, an denen sogenannte Bunch Compressors (engl. Paket-Komprimierer) verwendet werden, um die Pakete zu verkürzen und damit den Spitzenstrom im Paket auf bis zu 3.5 kA zu erhöhen.

Ursprünglich ging der Beschleuniger im Jahr 1966 in Betrieb und war zu diesem Zeitpunkt der Elektronenbeschleuniger mit der höchsten erreichbaren Energie. Er verwendete Radiofrequenzfelder zur Beschleunigung von Elektronen und Positronen. Mit seiner Hilfe wurden eine Vielzahl entscheidender Entdeckungen auf dem Gebiet der Hochenergiephysik gemacht, von denen drei – die Entdeckung des J/Ψ -Mesons, der Nachweis von Quarks und die Entdeckung des τ -Leptons – mit dem Nobelpreis ausgezeichnet wurden.

Undulator

Die Elektronenpakete gelangen vom Beschleuniger in einen 132 m langen Undulator, bestehend aus dreiunddreißig 3,4 m langen Elementen aus Permanentmagneten mit einer Undulatorperiode von 30 mm, resultierend in 112 m echter Undulatorlänge. Abbildung 3.2 zeigt eine Fotografie einiger der Undulatorelemente in der LCLS-Undulatorhalle. Die maximale erzeugte magnetische Feldstärke beträgt 1,25 T, entsprechend einem Undulatorparameter K von 3,5 [80]. Daraus folgt, daß die maximale Auslenkung der Elektronenpakete bei ihrer oszillierenden Bewegung etwa $3 \mu\text{m}$ beträgt. Die gemessene Verstärkungslänge bei $1,5 \text{ \AA}$ FEL-Photonen-Wellenlänge beträgt 3,5 m und nach etwa 60 von 132 m sättigt die Ausgangsleistung,



Abbildung 3.2. Zu sehen sind einige der 33 3,4 m langen Undulatorelemente in der LCLS-Undulatorhalle. (Foto: LCLS/SLAC [78])

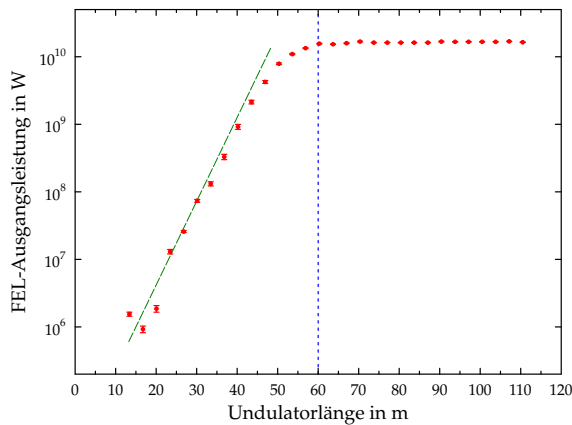


Abbildung 3.3. Die Ausgangsleistung des FEL, gemessen beim Einfügen der Undulator-Segmente. Die auf der horizontalen Achse aufgetragene Länge ist die Gesamtlänge der eingefügten Elemente. Nach bereits 60 m (gestrichelte blaue vertikale Linie) ist die Ausgangsleistung gesättigt. Die Steigung der gestrichelten grünen Linie entspricht einer Verstärkungslänge von 3,5 m. Die gezeigten Datenpunkte stammen von Emma et al. [39].

wie in Abbildung 3.3 illustriert. Damit sättigt LCLS etwas schneller, als nach der in Abschnitt 2.4, Unterabschnitt „Verstärkung und SASE“ genannten Abschätzung.

Der SXR-Hutch

Die erzeugte Strahlung gelangt vom Undulator in eine der beiden Experimentierhallen und dort in einen der sechs Experimentier-Hutches („Hutch“, engl. für „Stall“), in denen die Experimente der LCLS-Benutzer installiert sind. Nur jeweils ein Expe-

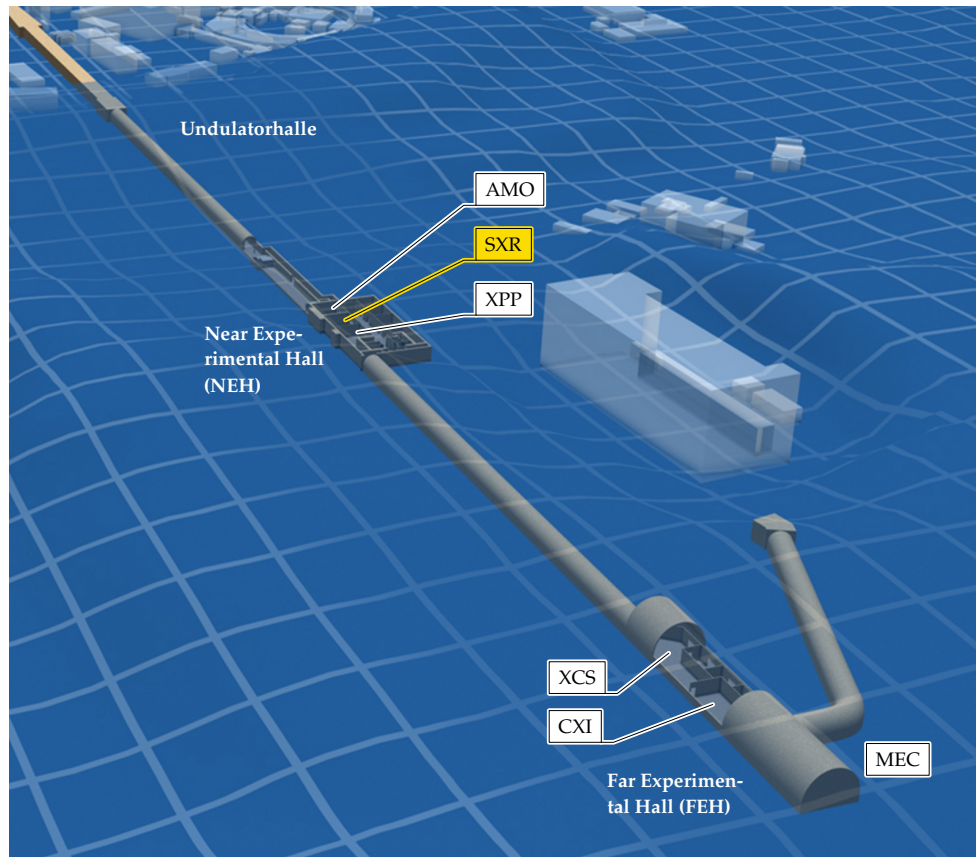


Abbildung 3.4. Eine Übersicht über die sich dem Beschleuniger anschließenden Einrichtungen bei LCLS. Die Elektronenpakete kommen von oben links. Die Röntgen-Strahlung wird in der Undulatorhalle erzeugt und gelangt in einen der sechs Experimentierbereiche in einer der beiden Experimentierhallen. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Experimente fanden im SXR-Hutch statt, der gelb hervorgehoben ist. (Bild: LCLS/SLAC [78], modifiziert)

riment kann den Photonenstrahl erhalten. Eine Übersicht aller Hutches und der Undulatorhalle ist in Abbildung 3.4 gezeigt.

Das hier beschriebene Experiment wurde im SXR-Hutch (Soft X-ray Research Instrument for Materials Science) [100] durchgeführt. Dieser befindet sich in der Near Experimental Hall (NEH), die sich direkt an die Undulatorhalle anschließt. Er wurde eingerichtet und wird betrieben von einem Konsortium bestehend aus SLAC, dem Stanford Institute of Material and Energy Science (SIMES), der Universität Hamburg, DESY, der Advanced Light Source (ALS) und dem Center for Free Electron Laser Science (CFEL, ebenfalls Hamburg).

Die Hauptkomponenten der SXR-Instrumentation sind in den Abbildungen 3.5 und 3.6 gezeigt. Zentrales Element im Strahlengang ist der Monochromator [60], der es erlaubt mit Hilfe eines Gitters aus dem etwa 30 eV breiten Spektrum des FEL

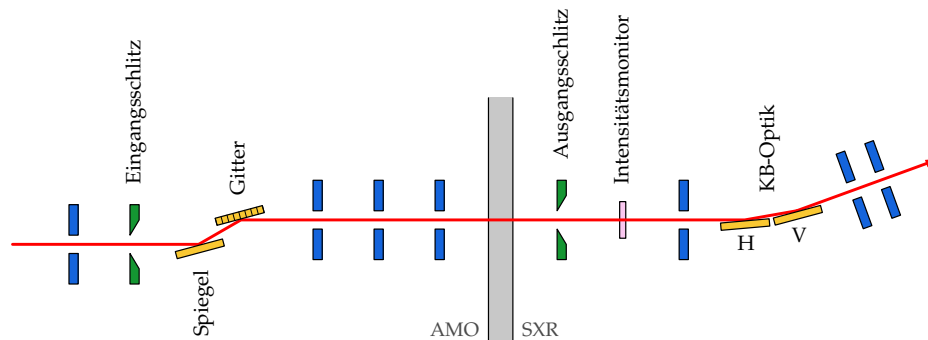


Abbildung 3.5. Hauptinstrument im SXR-Experimentierbereich ist ein Monochromator bestehend aus einem Spiegel und einem Gitter, sowie einem Eingangs- und einem Ausgangsschlitz. Außerdem vorhanden sind eine Reihe Strahlkollimatoren (blau), ein Intensitätsmonitor und eine KB-Optik zur Steuerung des Winkels unter dem der Strahl in das sich anschließende Nutzer-Experiment gelangt.

einen schmalbandigeren Bereich auszuwählen. Für Photonenenergien im Bereich von 1 keV besitzt der SXR-Monochromator eine Auflösung von minimal 0,5 eV. Der eigentliche Monochromator, bestehend aus einem Eingangsschlitz, einem Spiegel und dem Gitter mit variablem Linienabstand befindet sich im an den SXR-Hutch angrenzenden AMO-Hutch (Atomic and Molecular Optics). Nur der Ausgangsschlitz befindet sich im SXR-Hutch, wodurch der Abstand des Ausgangsschlitzes vom Gitter und damit auch das erreichbare Auflösungsvermögen maximiert wurden. Das Monochromatorgitter befindet sich 166 m vom Ende des Undulators entfernt. Der Ausgangsschlitz befindet sich in einem Abstand von 7,5 m vom Gitter. Sowohl Spiegel als auch Gitter bestehen aus mit Borcarbid beschichtetem Silizium und es stehen wahlweise zwei Gitter, eines 100 Linien pro Millimeter und eines mit 200 Linien pro Millimeter, zur Verfügung. Der Ausgangsschlitz ist vertikal angeordnet und kann bis auf 10 μm geschlossen werden.

Weitere Elemente sind eine Reihe Strahlkollimatoren und eine Kirkpatrick-Baez-Optik. Letztere ist ein System aus zwei gekrümmten Spiegeln, die das Röntgen-Licht unter streifendem Einfall reflektieren und so eine zweidimensionale Fokussierung des Strahls ermöglichen [75]. Der Krümmungsradius der beiden aus Silizium gefertigten Spiegel kann angepasst werden, um die Fokuslänge des Systems zu verändern. Der Fokuspunkt befindet sich etwa 1,5 m hinter dem vertikal fokussierenden Spiegel.

Außerdem befindet sich zwischen dem Ausgangsschlitz des Monochromators und der Kirkpatrick-Baez-Optik eine dünne Metallfolie, die als Intensitätsmonitor fungiert. Dazu werden die beim Beschuß mit Röntgen-Photonen freigesetzten Photoelektronen mit einem elektrischen Feld abgesaugt und als Strom gemessen. So kann die Intensität jedes einzelnen FEL-Schusses gemessen werden. Dies ist für die hier beschriebenen Messungen absolut notwendig, da Fluoreszenzausbeuten

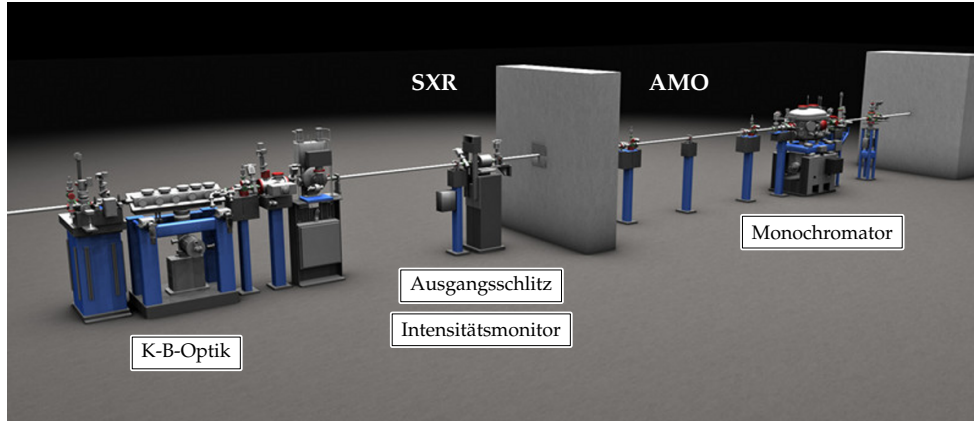


Abbildung 3.6. Eine Darstellung der wichtigsten Instrumente am SXR-Strahlrohr. In dieser Darstellung kommt der Photonenstrahl von rechts. Der eigentliche Monochromator befindet sich im AMO-Hutch. Nur der Ausgangsschlit ist im SXR-Hutch. Links von der K-B-Optik schloß sich bei den durchgeführten Experimenten die FLASH-EBIT als experimentelle Endstation an. (Bild: LCLS/SLAC [78], modifiziert)

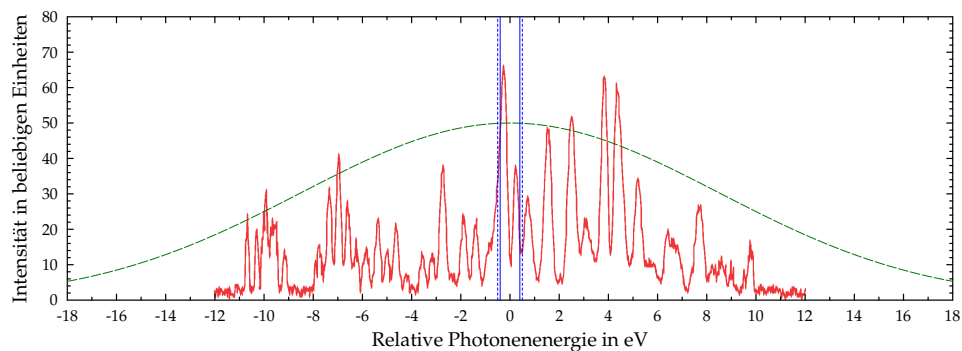


Abbildung 3.7. Gezeigt ist ein von Amann et al. [2] aufgenommenes Spektrum eines einzelnen FEL-Pulses (rot). Deutlich zu sehen ist die von der stochastischen Natur des SASE-Prozesses stammende spektrale Substruktur. Diese Strukturen besitzen Breiten von deutlich weniger als 1 eV. Werden die Spektren vieler Pulse gemittelt, dann ergibt sich eine Verteilung mit einer Halbwertsbreite von circa 20 eV. Eine solche ist als gestrichelte grüne Linie angedeutet. Das Maximum dieser Verteilung befand sich für die gezeigten Daten bei 8000 eV. Mit dem SXR-Monochromator wird aus dem Spektrum eines Schusses ein schmaler Bereich ausgeschnitten und gelangt ins Experiment. Als blaue senkrechte Linien sind die im Rahmen dieser Arbeit erreichten Monochromatorauflösungen von 0,8 eV (durchgezogen) beziehungsweise 1 eV (gestrichelt) angedeutet.

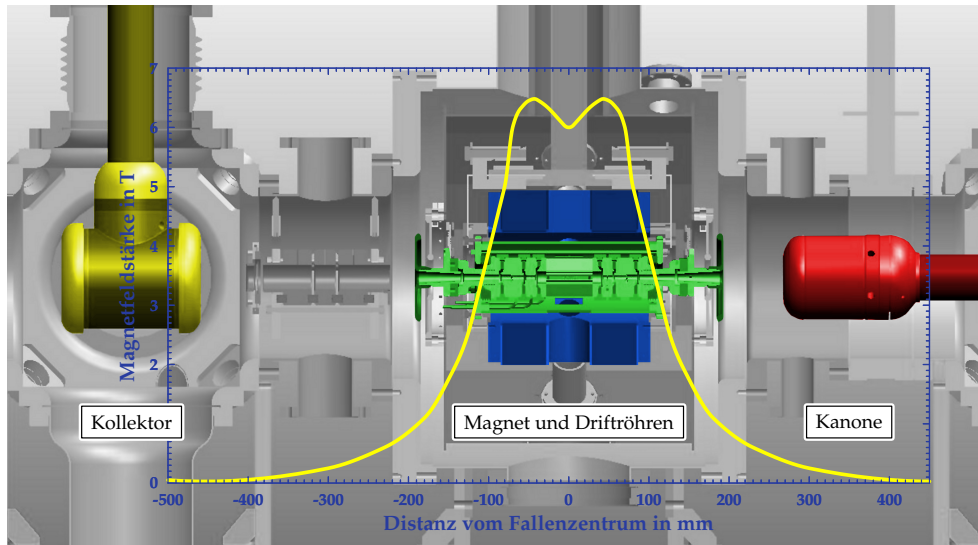


Abbildung 3.8. Die Hauptkomponenten der FLASH-EBIT sind dargestellt in einer Schnittdarstellung. Der Elektronenstrahl bewegt sich von der Elektronenkanone (rot) rechts zum Kollektor (gelb) links. Er passiert dabei die Driftröhren (grün), die sich im Innern des supraleitenden Magneten (blau) befinden. Außerdem zu erkennen sind die zusätzlichen Transportelektroden zwischen Driftröhren und Kollektor, sowie der Magnet und Driftröhren umschließende Hitzeschild. Die axiale Komponente des vom Magneten erzeugten Magnetfelds auf der zentralen Achse ist in gelb eingezeichnet. (Magnetfeld aus Epp (2007) [40].)

miteinander verglichen werden sollen. Dazu ist es erforderlich, die gemessenen Fluoreszenzraten gegen Schwankungen der Anzahl eingehender Photonen zu korrigieren.

3.2 Die FLASH-EBIT

Für die vorliegende Arbeit wurde die am Max-Planck-Institut für Kernphysik (MPIK) in Heidelberg gebaute FLASH-EBIT als Endstation bei LCLS eingesetzt. Ursprünglich unter der Bezeichnung Tesla-EBIT gebaut und in Betrieb genommen [40], zeichnet sie sich insbesondere dadurch aus, trotz hoher erreichbarer Elektronenströme und -energien, transportabel und vergleichsweise schnell in Betrieb zu nehmen zu sein. Außerdem ist die Flugrichtung der Elektronen horizontal und nicht wie zum Beispiel bei der Original-EBIT aus Livermore senkrecht, wodurch ein axialer Zugang zum Fallenzentrum möglich ist. So kann die Ionenwolke mit Strahlung von einer externen Strahlungsquelle zum Überlapp gebracht werden. Dies wurde bereits erfolgreich bei FLASH [41, 42], sowie im Rahmen der vorliegenden Arbeit bei LCLS sowie bei Messkampagnen an den Synchrotronen BESSY II [104–106] und in jüngerer Zeit PETRA III [98, 111] unter Beweis gestellt.

Elektronenkanone

Die Elektronen werden in einer thermionischen Kathode erzeugt. Diese besteht aus einer Wolfram-Matrix, in die Bariumoxid eingebracht ist. Durch elektrisches Heizen auf Temperaturen oberhalb von 1200 K werden aus dem Barium thermische Elektronen freigesetzt. Diese Elektronen werden in Richtung einer als rotationssymmetrischen Hohlelektrode realisierten Anode beschleunigt. Dazu wird die Kathode zusammen mit dem Kathodenhalter, auf dem sie befestigt ist, auf bis zu -2 kV gegenüber Erdpotential gelegt. Zwischen Kathode und Anode befindet sich eine weitere Elektrode, die nach dem Prinzip eines Wehnelt-Zylinders zur Steuerung des Elektronenstroms verwendet wird und als Fokuselektrode bezeichnet wird.

Zusätzlich zu den elektrostatischen Elementen existieren noch zwei Magnetspulen, Bucking- und Trimm-Spule, die um die Kathode angeordnet sind, und deren Zweck es ist, das vom die Falle umgebenden Magneten stammende Restmagnetfeld zu kompensieren. Dies ist notwendig, da eine effektive magnetische Kompression des Elektronenstrahls nur möglich ist, wenn am Ort der Erzeugung des Strahls nur ein vergleichsweise schwaches Feld vorhanden ist. Die beiden Spulen und die Kathode erwärmen sich im Betrieb stark und werden deshalb mit Wasser gekühlt.

Die Kanone kann zur besseren Kontrolle der Elektronenstrahleigenschaften sowohl horizontal als auch vertikal senkrecht zur Strahlrichtung bewegt werden. Weiterhin ist es möglich die Kanone entlang der Strahlachse zu bewegen. So kann sie gänzlich in eine eigene Vakuumkammer zurückgezogen werden, die mit Hilfe eines Ventils vom Rest der EBIT getrennt werden kann. Hierdurch kann die Kanone mit ihrer auf Sauerstoff empfindlich reagierenden Kathode auch dann unter Vakuum gehalten werden, wenn im Rest der EBIT Normaldruck herrscht, was zum Beispiel für die Anbringung von Detektoren notwendig ist.

Magnet

Das zur Kompression des Elektronenstrahls notwendige Magnetfeld wird erzeugt durch einen supraleitenden Magneten der Firma Cryogenics, bei dem Nb_3Sn mit einer Sprungtemperatur von 17 K als Supraleiter verwendet wird [40]. Der Magnet ist als Spulenpaar ausgeführt und wird im Betrieb von einem Strom von 114 A durchflossen, wodurch im Fallenzentrum eine konstante magnetische Feldstärke von 6 T erreicht wird. Das Spulenpaar ist nicht in der für ein möglichst homogenes zentrales Magnetfeld optimalen Helmholtz-Konfiguration ausgeführt, um einen Besseren Zugang zum Fallenzentrum zu ermöglichen [40]. Dieser Zugang erfolgt durch sieben Bohrungen in die Magnetspulen haltenden Magnetformer, die senkrecht zur Magnetfeld- und damit Elektronenstrahlachse verlaufen. Damit sind Zugänge beidseitig horizontal, einseitig vertikal und aus vier Richtungen unter einem Winkel von 45° zur Horizontalen möglich.

Um die Temperatur des Magneten unter die Sprungtemperatur zu senken und damit den supraleitenden Betrieb zu ermöglichen kommt ein Kältekopf zum Einsatz. In diesem wird Helium als Kühlmittel durch einen Kompressor abgekühlt und befindet sich in einem geschlossenen Kreislauf. Durch das Helium werden zwei Kältestufen auf 4 K beziehungsweise 30 K gekühlt, die thermisch an die zu kühlenden Elemente gekoppelt sind. Der supraleitende Magnet und die Driftröhren sind direkt mit der 4-K-Stufe verbunden. Zusätzlich sind Magnet und Driftröhren von einem alles umschließenden Hitzeschild umgeben, der an die 30-K-Stufe gekoppelt ist. Dieser Hitzeschild schirmt das Innere vor dem Wärmeeintrag durch Wärmestrahlung die von der auf Zimmertemperatur befindlichen Umgebung ausgeht.

Die niedrige Temperatur, die ohnehin zum Betrieb des supraleitenden Magneten notwendig ist, trägt außerdem dazu bei, den Restgasdruck im Fallenzentrum deutlich zu senken. Stickstoff und Sauerstoff werden bei den herrschenden niedrigen Temperaturen fest und der verbleibende Restgasdruck wird dominiert durch den Dampfdruck von Helium und Wasserstoff, der mit sinkender Temperatur deutlich abnimmt [40].

Driftröhren

Die FLASH-EBIT besitzt neun Driftröhren, die im wesentlichen rotationssymmetrisch um die Elektronenstrahlachse sind. Diese sind in Abbildung 3.9 zu sehen. Nur die zentrale Driftröhre besitzt acht Schlitze in axialer Richtung, die einen direkten radialen Zugang zum Fallenzentrum ermöglichen. Sieben dieser Schlitze sind durch die Bohrungen im Magnetformer von außen zugänglich. Das Driftröhren-Ensemble ist in Abbildung 3.8 in grün hervorgehoben. Alle Driftröhren können gemeinsam auf bis zu 30 kV gegenüber Erdpotential gelegt werden. Gleichzeitig können alle Driftröhren einzeln zusätzlich auf Potentiale bis zu 5 kV gegenüber dieser gemeinsamen Hochspannung gebracht werden. Durch diesen Aufbau ist es möglich sowohl die Elektronenstrahlenergie über einen weiten Bereich zu variieren, als auch die Potentiallandschaft in der Falle sich ändernden, vom Experiment abhängigen Bedingungen anzupassen.

Zwischen Driftröhren und Kollektor sind zusätzliche Elektroden vorhanden, die dazu dienen den Elektronen-, oder bei Extraktion von Ionen aus der Falle auch den Ionen-Transport auf der vergleichsweise langen Strecke durch Refokussierung zu optimieren.

Kollektor

Die Elektronen werden im Kollektor aufgefangen. Dieser liegt auf Erdpotential und damit auf einem positiven Potential relativ zur Kathode, wodurch die kinetische Energie der Elektronen hier maximal 2 keV beträgt. Am aus Sicht des Elektronenstrahls rückseitigen Ende des Kollektors befindet sich der Extraktor, eine elektrosta-

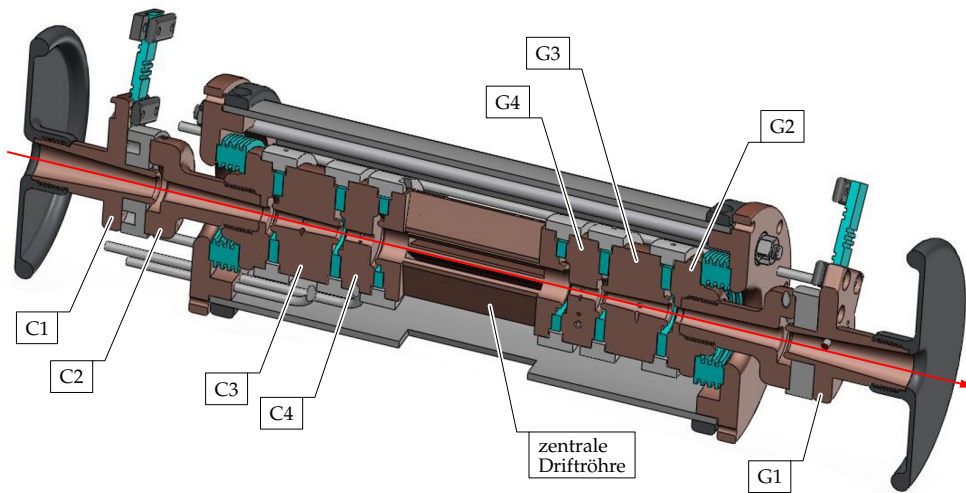


Abbildung 3.9. Das Driftröhrenensemble der FLASH-EBIT besteht aus neun einzeln auf Hochspannung legbaren Elektroden. Sowohl auf Kollektorseite (C1–C4) als auch auf Kanonenseite (G1–G4) sind jeweils vier Elektroden vorhanden. In der Mitte befindet sich die zentrale Driftröhre. Diese besitzt eine Länge von circa 50 Millimetern und ist mit acht Schlitzfenstern versehen, die einen Sichtzugang zum Fallenzentrum gestatten. Der vom FEL kommende Photonenstrahl durchquert die Falle von links nach rechts und ist als roter Pfeil angedeutet.

tische Elektrode, die auf ein deutlich negativeres Potential als die Kathode gelegt wird, um zu gewährleisten, daß die Elektronen im Inneren des Kollektors gestoppt werden. Durch eine Magnetspule wird das Restmagnetfeld des supraleitenden Magneten kompensiert, wodurch der Elektronenstrahl aufgeweitet wird und auf die Kollektorinnenseite trifft. Sowohl die Spule, als auch die Kollektorinnenseite werden mit Wasser gekühlt. Zusätzlich existieren mit Front- und Back-Shield, sowie Suppressor weitere elektrostatische Elemente, die vornehmlich der Verbesserung der Elektronenstrahlführung dienen. Der Kollektor ist elektrisch isoliert und durch einen $10\text{-}\Omega$ -Widerstand mit dem Erdpotential verbunden. Dadurch ist es möglich durch eine einfache Spannungsmessung den aktuellen Elektronenstrahlstrom zu messen.

Der Kollektor ist im Wesentlichen zylindersymmetrisch ausgeführt und ist an beiden Enden offen, wodurch ein axialer Zugang zur Falle erlaubt wird. Damit ist es möglich zum Beispiel Ionen aus der Falle zu extrahieren oder, wie im Fall der vorliegenden Arbeit, einen Photonenstrahl axial mit der Ionenwolke zu überlappen.

Elektrostatisher Ablenker

Durch geeignete Wahl der Driftröhrenpotentiale kann es Ionen ermöglicht werden, aus der Falle zu entkommen. Wird die Falle auf diese Weise in Richtung des Kollektors geöffnet, so können Ionen durch diesen hindurch extrahiert werden. Sie

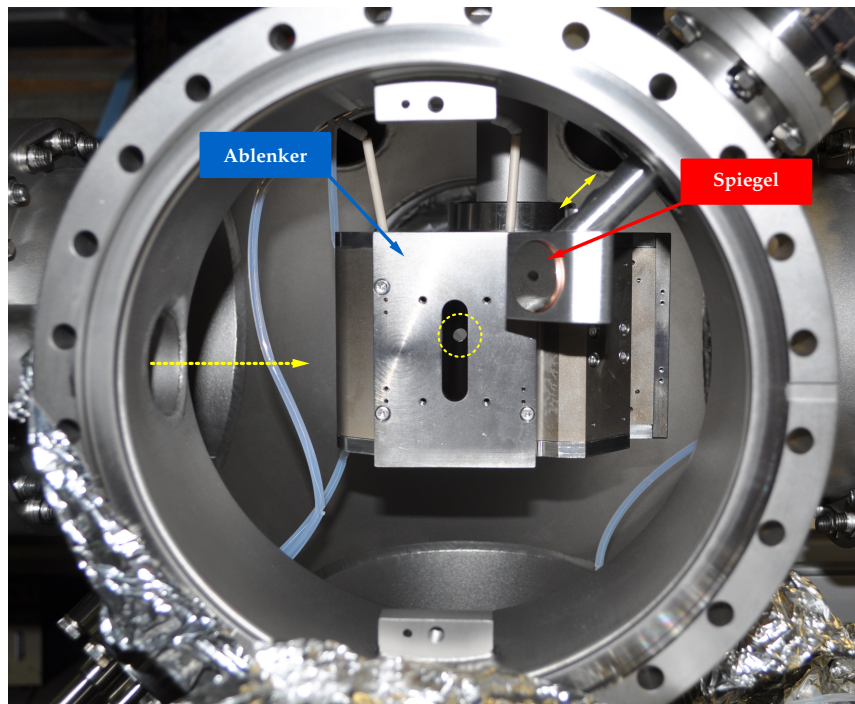


Abbildung 3.10. Gezeigt ist die zur zweiten Messkampagne 2012 neu in Betrieb genommene Ablenker-Kammer aus Richtung der EBIT vor der endgültigen Montage. Der Photonenstrahl geht durch den elektrostatischen Ablenker (blau). Hierfür passiert er ein Loch im Ablenker (gelber gestrichelter Kreis). Die Strahlrichtung ist aus der Blattebene hinaus. Ein zur Strahlachse um 45° geneigter Spiegel mit zentraler Bohrung (rot) kann in den Strahlengang bewegt werden (gelber Doppelpfeil). Der Photonenstrahl geht dann durch die Bohrung und durch ein an der Vakuumbuchse seitlich angebrachtes Fenster kann über den Spiegel in Richtung EBIT geschaut werden (gelber gestrichelter Pfeil). (Foto: J. K. Rudolph)

können dann entweder anderen Experimenten zugeführt werden oder mit Blick auf die Element- und Ladungszustandsverteilungen analysiert werden.

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen spielten extrahierte Ionen keine Rolle. Der elektrostatische Ablenker befindet sich jedoch im Strahlengang der Röntgen-Photonen und stellt in Form eines Spiegels ein wichtiges Werkzeug zur Herstellung des Überlapps von Photonenstrahl und Ionenwolke zur Verfügung. Bei der ersten der beiden durchgeführten Messkampagnen wurde ein ursprünglich für Messungen von Photoionisationsprozessen entwickelter kompakter Ablenker eingesetzt [107]. Dieser wurde bei der zweiten Kampagne durch ein neues Modell ersetzt [98]. Dieses ist in Abbildung 3.10 zu sehen. Auf beide Ablenker wird in Abschnitt 3.5 mit Hinblick auf ihre Rolle bei der Herstellung des Strahlüberlapps näher eingegangen.

Vakuum- und Injektionssystem

Das Vakuum in der EBIT wird durch ein zweistufiges Pumpsystem erzeugt und aufrechterhalten. Dabei sind an der Magnetkammer, sowie an der Kanonen- und der Kollektorkammer Turbomolekularpumpen angebracht. Eine weitere solche Pumpe ist an der Kammer des elektrostatischen Ablenkers montiert. All diese Pumpen sind an ein gemeinsames Vorvakuum angeschlossen, das von einer weiteren Turbomolekularpumpe erzeugt wird, die ihr Vorkvakuum wiederum von einer Scollpumpe erhält. Zusätzlich sind an Kollektor- sowie Kanonenkammer sogenannte Getter-Pumpen vom Typ NEG (engl. Non-Evaporable Getter) angebracht, die Restgas chemisch binden und so auch ohne extreme Energiezufuhr arbeiten. Dieserart werden im Bereich der Kanone typische Drücke von einigen 10^{-10} Millibar erreicht, wenn die Kanonen-Kammer vom Rest der EBIT getrennt ist. Sind die Vakua verbunden, so herrschen bei Zimmertemperatur über die gesamte EBIT hinweg 10^{-8} bis 10^{-7} Millibar. Befindet sich das Innere der Magnetkammer auf kryogenischen Arbeitstemperaturen, so werden durch die zusätzliche Saugleistung (siehe auch Unterabschnitt „Magnet“ oben) Drücke von typischerweise 10^{-9} Millibar möglich.

Das zu ionisierende Gas wird über ein Gasinjektionssystem in die EBIT eingebracht. Dieses besteht aus einem Dosierventil, an dem eine Gasquelle angeschlossen werden kann, sowie zwei durch eine Blende getrennten differentiellen Druckstufen. Zwischen der zweiten Druckstufe und der EBIT-Kammer befindet sich eine weitere Blende, gefolgt von Blenden am Hitzeschild und am Magnetformer, nahe an den Driftröhren. Auf diese Weise soll ein auf das Fallenzentrum beschränkter Gasstrahl realisiert werden. Das zweistufige Pumpsystem erlaubt es, Gas mit wohldosierbarem Fluß in die Kammer zu bringen, ohne den Druck in der gesamten EBIT deutlich zu erhöhen.

Gewöhnlicherweise ist das Gasinjektionssystem der FLASH-EBIT an einem der beiden oberen Fallenzugängen unter 45° angebracht. Dies war auch bei der Messkampagne im Jahr 2011 der Fall. Für die Kampagne 2012 wurde, wie in Abschnitt 3.4, Unterabschnitt „Detektorenanordnung“ beschrieben wird, die Belegung der Fallenzugänge verändert. Im Zuge dieser Maßnahmen wurde auch das Gasinjektionssystem versetzt und befand sich anschließend an einem der beiden horizontalen Zugänge. Weiterhin kam dabei aus technischen Gründen nicht der Original-Gasinjektor der FLASH-EBIT zum Einsatz, sondern ein bauähnlicher Injektor, der vom LLNL zur Verfügung gestellt wurde. Beide Konfigurationen sind auch in Abbildung 3.20 dargestellt.

Erzeugung von Eisenionen

Zur Erzeugung von Eisenionen war es notwendig Eisen gasförmig durch das Gasinjektionssystem in die Falle einzubringen. Da Eisen bei Zimmertemperatur nicht gasförmig vorliegt, wurde Eisenpentacabonyl ($\text{Fe}(\text{CO})_5$) verwendet. Diese Verbin-

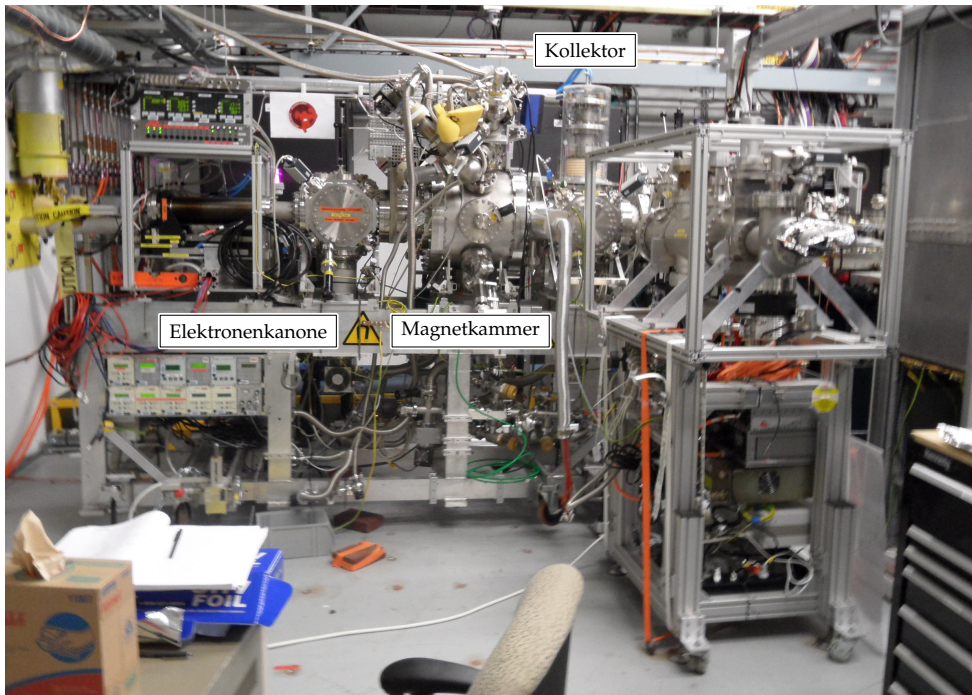


Abbildung 3.11. Die Fotografie zeigt die FLASH-EBIT im SXR-Hutch. Aus der gezeigten Perspektive kommt der Photonenstrahl von rechts. Zur Orientierung sind Elektronenkanone, Magnetkammer und Kollektor beschriftet. Zum Zeitpunkt der Aufnahme waren noch keine Fluoreszenzdetektoren montiert. Im Vordergrund auf der rechten Bildseite ist das Ionenextraktionssystem zu sehen, daß für die vorliegende Arbeit keine Rolle spielte.

dung liegt in flüssigem Zustand vor, besitzt jedoch einen Dampfdruck von etwa 30 Millibar, wodurch sich in einer ans Injektionssystem angeschlossenen Flasche genug Moleküle in der Gasphase befinden, um diese in ausreichendem Maß in die Falle gelangen zu lassen. Dort können die Moleküle durch den Elektronenstrahl aufgebrochen werden und atomares und niedergeladenes Eisen wird freigesetzt, das der Elektronenstrahl dann zu den gewünschten hohen Ladungszuständen hochionisiert.

3.3 Die FLASH-EBIT als LCLS-Endstation

Der Betrieb als Endstation am SXR-Strahlrohr bei LCLS machte eine Reihe technischer Anpassungen der FLASH-EBIT notwendig, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Die EBIT wurde außerdem nicht fest bei LCLS installiert, sondern musste weiterhin transportabel bleiben. Abbildung 3.11 zeigt die FLASH-EBIT im SXR-Hutch.

Verkleinerung und Vakuumsystem

Um im verfügbaren Raum am Ende des Strahlrohrs untergebracht werden zu können war eine Verkürzung der EBIT notwendig. Hierzu wurden eine Reihe Keramik-isolatoren entfernt, die ursprünglich dazu dienten, die gesamte Elektronenkanone vom Erdpotential zu trennen und damit auf Hochspannung legbar zu machen. Dadurch wären höhere Elektronenstrahlenergien möglich, welche jedoch für die durchgeführten Experimente nicht notwendig waren. Zusätzlich wurden auch am Kollektor Isolatoren entfernt, wodurch die Gesamthöhe der EBIT reduziert wurde, um den Transport zu erleichtern und sicherzustellen, daß vor Ort alle notwendigen Türen passiert werden konnten.

Weiterhin wurden alle für den Betrieb des EBIT-Vakuumsystems notwendigen Pumpen-Controller und Drucksonden-Controller direkt am Gestell der EBIT montiert und zusammen mit den Turbomolekularpumpen mit einer gemeinsamen Spannungsversorgung versehen. Damit war es vor Ort möglich das Vakuumsystem ohne weitere Vorarbeiten sofort in Betrieb zu nehmen.

Strahlstopper

Die Photonenpulse des LCLS transportieren einige mJ pro Puls mit einer Wiederholrate von 120 Hz, entsprechend Leistungen in der Größenordnung von hunderten mW. Durch die kurzen Pulsdauern von einigen zehn bis hundert Femtosekunden, treten jedoch kurzzeitig Leistungen von mehreren Gigawatt auf, die nach der Durchquerung des Fallenzentrums direkt auf die Elektronenkanone treffen würden. Selbst unfokussiert ist die Auftrefffläche weniger als 1 mm^2 groß. Diese stark lokalisierte Leistungsdeposition könnte eventuell zu Schäden an der Kanone oder zumindest zur Abdampfung von Oberflächenmaterial führen. Aus diesen Gründen und wegen der geltenden Sicherheitsauflagen bei LCLS wurde ein Strahlstopper konstruiert, der auf die Elektronenkanone montiert wurde, wie in Abbildung 3.12 illustriert. In Abbildung 3.13 ist eine Fotografie des Strahlstoppers gezeigt. Auf dieser ist auch ein rechteckiger Cer-dotierter YAG-Kristall zu sehen, der auf dem Stopper angebracht wurde, um unter Umständen zur Abbildung des FEL-Strahls zu dienen, was jedoch bei den durchgeführten Experimenten nicht notwendig war.

Als absorbierendes Material wird Borcarbid (B_4C) verwendet, eine Keramik, welche eine hohe mechanische Härte und thermische Widerstandsfähigkeit aufweist und wegen ihrer Eigenschaften auch zur Beschichtung von Röntgen-Spiegeln verwendet [11, 109] wird. Der Absorber besitzt in der Mitte ein Loch, durch das die Elektronen die Kanone verlassen können. Um einen glatten elektrischen Potentialverlauf zu gewährleisten und um zu verhindern, daß der Elektronenstrahl direkt auf das Borcarbid trifft, befindet sich eine zylindrische Kupferelektrode in diesem Loch.

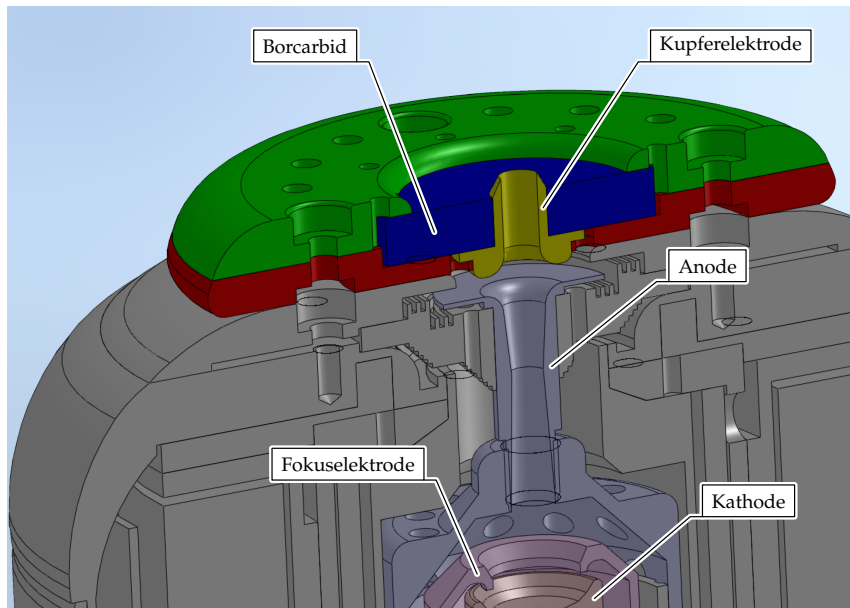


Abbildung 3.12. Der Strahlstopper besteht aus einer Scheibe aus Borcarbid (blau) mit einer zentralen Bohrung, in der sich eine Elektrode aus Kupfer (gelb) befindet. Beides wird zusammen gehalten von einer Halterung aus Aluminium (rot und grün), die direkt auf die Frontplatte der Elektronenkanone geschraubt wird. Die Halterung wurde so ausgestaltet, daß ein glatter elektrischer Potentialverlauf gewährleistet ist. Weiterhin hervorgehoben sind die Elektroden (Kathode, Anode und Fokuselektrode) der Elektronenkanone.

Während des Betriebs wurde sichergestellt, daß der Photonenstrahl nicht durch das zentrale Loch im Strahlstopper in die Kanone und damit direkt auf die Kathode fällt, sondern auf den Absorber. Dazu wurde die Elektronenkanone seitlich leicht aus der Strahlachse heraus bewegt. Für diesen Zweck stehen an der FLASH-EBIT zwei Linearmanipulatoren zur Verfügung. Obwohl die Kathode sich so nicht mehr auf der Zentralachse der Driftröhren befand, wurde der Elektronenstrahl durch das Magnetfeld soweit geführt, daß er bis zum Kollektor gelangen konnte und die Funktion der EBIT nicht eingeschränkt war. Zu Testzwecken wurde die EBIT im Betrieb schrittweise geneigt und der Photonenstrahl dadurch immer näher an die Kathode heran bewegt. Bei zu großer Nähe des Photonenstrahls zur Kathode war ein weiterer stabiler Betrieb der EBIT nicht möglich. Teilweise brach der Elektronenstrom komplett zusammen.

Maschinenfüße

Um einen Überlapp von Ionen und Photonen herzustellen (siehe Abschnitt 3.5) war es notwendig, die gesamte EBIT mit einer Genauigkeit im Bereich von Mikrometern zu positionieren und dies auch dann tun zu können, wenn sich der Photonenstrahl in der EBIT befindet. Da bei LCLS ein Zugang zum Experiment



Abbildung 3.13. Die absorbierende Fläche (1) des Strahlstoppers besteht aus Borcarbid und besitzt eine zentrale Bohrung, in der sich eine Elektrode aus Kupfer (2) befindet, durch die der Elektronenstrahl aus der Kanone heraustritt. Zusätzlich wurde ein rechteckiger Cer-dotierter YAG-Kristall (3) auf der Absorberfläche angebracht. Auf diesem kann der Röntgen-Strahl vom FEL abgebildet werden.

bei eingeschaltetem Photonenstrahl jedoch nicht möglich ist, war es notwendig, ein komplett ferngesteuertes Positionierungssystem zu entwickeln. Dieses besteht aus drei Füßen am Gestell der EBIT (siehe Abbildungen 3.14 und 3.15), die jeweils eine vertikale Bewegung bewerkstelligen können. Dazu sind die Füße an Spindelhubgetrieben montiert, die über stark untersetzende Getriebe mit Schrittmotoren ausgestattet sind. Die verwendeten Motoren sind kompatibel mit dem bei LCLS verwendeten Schrittmotorsystem und konnten deshalb in die vorhandene Infrastruktur integriert werden, die auch eine Fernsteuerung über das Netzwerk zulässt.

Mit diesem Aufbau sind vertikale Bewegungen über einen großen Bereich, sowie Rollbewegungen um die Strahlachse und Neigungen um die zur Strahlachse senkrechte Horizontale möglich. Ist durch eine grobe Vorpositionierung der EBIT sichergestellt, daß der Photonenstrahl vom Kollektor zur Kanone gelangt, dann ist die Strahlrichtung bereits gut definiert und die Lage des Photonenstrahls im Fallenzentrum kann durch das Positionierungssystem mit hoher Präzision festge-

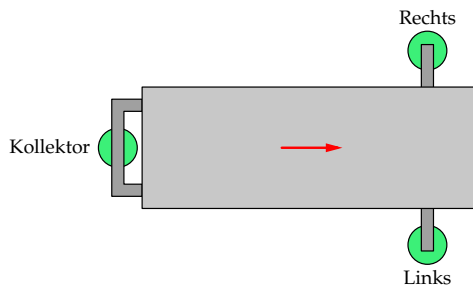


Abbildung 3.14. An der hier durch ein graues Rechteck repräsentierten EBIT wurden drei Maschinenfüße (grün) angebracht, die einzeln höhenverstellbar sind. Die Photonenstrahlrichtung wird durch einen roten Pfeil angedeutet. So konnte die gesamte EBIT in zwei Richtungen gekippt werden.

legt werden. Eine Rollbewegung ist bei den notwendigen kleinen Verschiebungen nahezu identisch zu einer horizontalen Bewegung. Durch die Verwendung von Schrittmotoren zusammen mit Getrieben mit hoher Untersetzung ist eine hohe Stabilität und Reproduzierbarkeit gegeben.

Beim Einsatz im Experiment hat sich gezeigt, daß der Photonenstrahl gezielt über die gesamte durch den Kollektor sichtbare Querschnittsfläche der zentralen Driftröhre hinweg positioniert werden konnte. Die Reproduzierbarkeit der Position lag in der Größenordnung der Auflösung der verwendeten Kameras (siehe Abschnitt 3.5), war demzufolge besser als $20\ \mu\text{m}$.

Strahlunterbrecher mit Strahlmonitor

Zwischen elektrostatischem Ablenker und LCLS-Strahlrohr wurde ein ferngesteuerter Strahlunterbrecher montiert, auf dem ein Fluoreszenzschirm zum ortsauflösenden Nachweis von Röntgen-Photonen angebracht ist. Dieser ist in Abbildung 3.16 zu sehen. In seinen drei möglichen Stellungen stoppt er den Strahl, lässt ihn durch oder zeigt seine Position an. Als Fluoreszenzschirm kommt ein Cer-dotierter YAG-Kristall mit einem Durchmesser von 20 mm zum Einsatz, der über einen in der SXR-Strahloptik und -diagnose bereits vorhandenen um 45° gedrehten und mit einem zentralen Loch versehenen Spiegel mit einer Kamera betrachtet werden kann. Die drei Stellungen werden durch einen einfachen Servomotor angefahren, der von einem Mikrocontroller gesteuert wird. Als Mikrocontroller kam ein ATmega328 auf einem Arduino-Uno-Board [3] zum Einsatz, wodurch es auf einfache Weise möglich wurde, den Strahlunterbrecher mit einer USB-Schnittstelle auszustatten, die zusammen mit einem eigens dafür geschriebenen Computerprogramm eine Fernsteuerung ermöglicht.

Strahlstromstabilisierung

Auch wenn alle Potentiale in der EBIT zeitlich konstant gehalten werden, wird der Elektronenstrahlstrom dennoch zeitlichen Schwankungen unterliegen. Diese Schwankungen sind unvorhersehbar und besitzen je nach herrschenden Bedingungen Amplituden von bis zu einigen zehn mA. Es ist sogar möglich, daß der

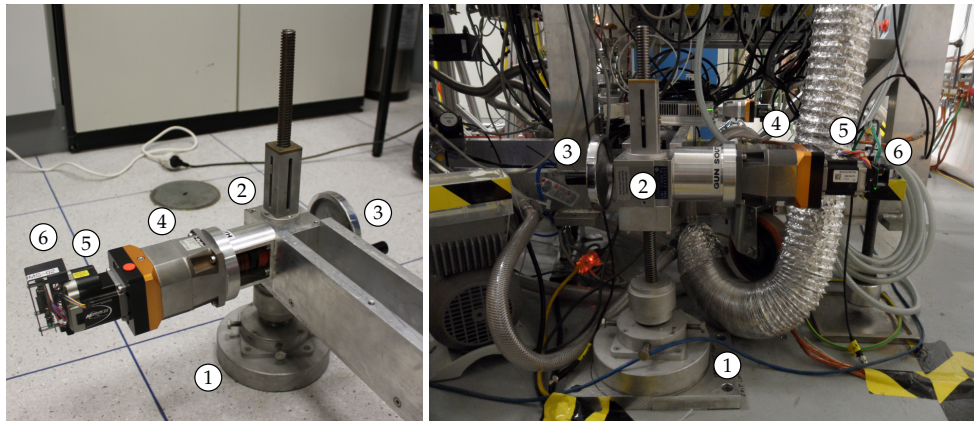


Abbildung 3.15. Gezeigt sind zwei Ansichten eines der drei motorisierten Füße am Gestell der FLASH-EBIT. Der eigentliche Fuß (1) ist an der Gewindestange eines Spindelhubgetriebes (2) montiert. Für die manuelle Grobausrichtung kann die Höhe jedes einzelnen Fußes per Handrad eingestellt werden (3). Um den Überlapp von Photonenstrahl und Ionenwolke herzustellen und zu optimieren, könne die Füße über Getriebe (4) mit Schrittmotoren (5) verfahren werden. Die Motoren sind mit einer Elektronik (6) ausgestattet, die eine Integration in die zur Motorsteuerung bereitstehenden Hard- und Software des SXR-Hutches ermöglicht. Die vier Schrauben an den Füßen erlauben bei Bedarf eine Parallelverschiebung der gesamten EBIT um wenige Millimeter.

Strahlstrom beim unkontrollierten Steigen oder Sinken letztendlich gänzlich abbricht. Eine Ursache hierfür liegt vermutlich in der Kathode der Elektronenkanone, auf deren Oberfläche chemische Prozesse stattfinden, die zu einer zeitlichen Variation der Beschaffenheit sowie Temperatur der Oberfläche führen, was sich letztlich in einer sich ändernden Elektronenemission niederschlägt. Außerdem kommt es eventuell zu einer elektrischen Aufladung von Bauteilen, die dann zu sich zeitlich verändernden Potentialen führt. Auch hierdurch kann der Strahl instabil werden.

Der Strahlstrom ist einer der bestimmenden Faktoren für die sich in der EBIT einstellende Ladungszustandsverteilung (siehe auch Abschnitt 2.5). In den durchgeführten Experimenten sollten Fluoreszenzraten verglichen werden. Diese hängen einerseits ab von den Raten der beteiligten Übergänge, andererseits aber auch von den Zahlen der wechselwirkenden Photonen und Ionen. Die Zahl der in die Falle gelangenden Photonen war, durch das Funktionsprinzip des FEL bedingt, von Schuß zu Schuß stark unterschiedlich, was wie in Abschnitt 3.1, Unterabschnitt „Der SXR-Hutch“, beschrieben eine begleitende Intensitätsmessung und anschließende Korrektur notwendig machte. Eine weitere mögliche Verfälschungen der gemessenen Raten durch einen sich ändernden Strahlstrom sollte ausgeschlossen werden. Hierzu wurde eine Stabilisierung des Strahlstroms durch Software realisiert.

Die Netzteile, die eingesetzt werden, um die Elektroden in der Elektronenkanone auf ihre jeweiligen Potentiale zu legen, werden gesteuert durch eine in LabVIEW programmierte Steuer-Software. Diese setzt nicht nur die gewünschten

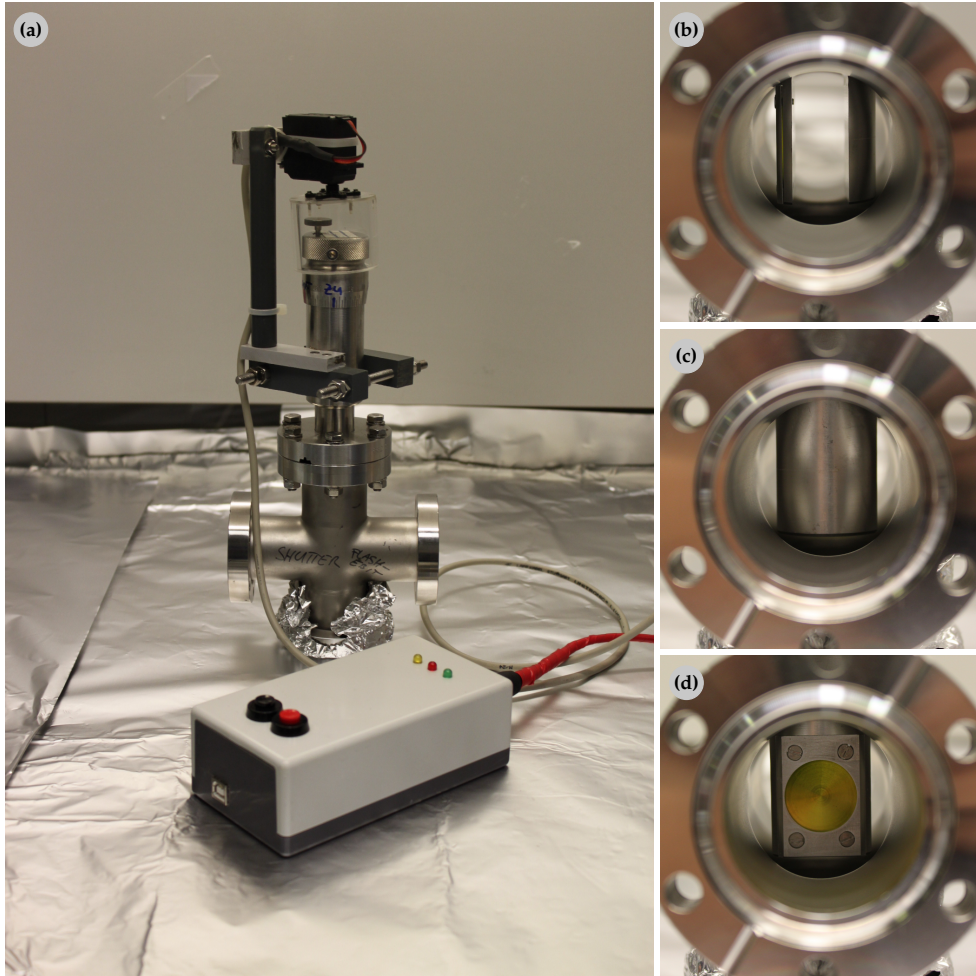


Abbildung 3.16. Gezeigt sind der Strahlunterbrecher mit Steuerelektronik (a) und die drei möglichen Stellungen des Strahlunterbrechers fotografiert in Strahlrichtung. Diese sind „offen“ (b), „geschlossen“ (c) und „Fluoreszenz-Schirm“ (d).

Spannungen, sondern liest unter anderem auch den aktuellen Strahlstrom I_e aus. Die Stabilisierung des von I_e erfolgt über eine Regelung der Fokusspannung U_F , die in diskreten Zeitschritten Δt erfolgt. Der ausgelesene Wert von I_e ist von einem Rauschen mit einer Amplitude von etwa 2 mA überlagert. Um eine Steuerung von U_F zu ermöglichen, die weitaus besser als auf 2 mA genau regelt, wird zum Zeitpunkt t der geglättete Strom

$$\bar{I}_e(t) = \eta \bar{I}_e(t - \Delta t) + (1 - \eta) I_e(t) \quad (3.1)$$

herangezogen. Dieser ist der gewichtete Mittelwert aus dem aktuell gemessenen Strom und dem geglätteten Strom aus dem letzten Zeitschritt. Der Faktor η legt dabei fest, wie stark der Einfluß vergangener Messungen auf den neuen Wert ist.

Die Ströme sind per Konvention negativ. Deshalb muss U_F größer werden, wenn \tilde{I}_e zu groß ist, also näher bei Null liegt. Ist der Sollstrom I_e^S , dann ist

$$\delta = \frac{\tilde{I}_e(t) - I_e^S}{I_e^S} \quad (3.2)$$

die relative Abweichung von diesem. Die Fokusspannung, die zum Zeitpunkt t gesetzt wird, ist dann

$$U_F(t) = U_F(t - \Delta t) - \Delta U(\delta) , \quad (3.3)$$

mit der Spannungsänderung

$$\Delta U(\delta) = \begin{cases} -\Delta U_{\max} & \text{für } \delta < -\delta_{\max} \\ \frac{\delta}{\delta_{\max}} \cdot \Delta U_{\max} & \text{für } -\delta_{\max} \leq \delta \leq \delta_{\max} \\ \Delta U_{\max} & \text{für } \delta > \delta_{\max} \end{cases} . \quad (3.4)$$

Dabei ist ΔU_{\max} die maximale Spannungsänderung pro Zeitschritt, die dann erfolgt, wenn $|\delta| > \delta_{\max}$. Beide Größen sind frei wählbar und müssen zusammen mit η so gewählt werden, daß die Regelung nicht durch Überkompensation zu Oszillationen des geregelten Strahlstroms führt. Erstmals wurde eine ähnliche Strahlstromstabilisierung an der Heidelberg-EBIT, einer anderen EBIT am MPIK, getestet und anschließend in abgewandelter Form an der FLASH-EBIT dazu eingesetzt, bei einer kontinuierlichen Änderung der Elektronenstrahlenergie die Raumladungsdichte des Strahls konstant zu halten [110]. Für die hier beschriebenen Messungen wurde die oben beschriebene Regelung als fester Bestandteil in die Elektronenkanonen-Steuersoftware der FLASH-EBIT integriert.

3.4 Detektoren

Zum Nachweis der Fluoreszenzphotonen wurden eine Reihe unterschiedlicher Detektoren eingesetzt, die auf unterschiedlichen Nachweisprinzipien beruhen und sich hinsichtlich ihrer Energie- und Zeitauflösungen deutlich unterscheiden.

Germanium-Detektoren

Eine zentrale Rolle bei den durchgeführten Experimenten spielten die verwendeten Halbleiterdetektoren aus hochreinem Germanium (HPGe, high purity germanium). Bei diesen sind sich gegenüberliegende Oberflächen eines Germaniumkristalls p- beziehungsweise n-dotiert. Wird nun an die n-dotierte Schicht eine positive Spannung gegenüber der p-dotierten Schicht angelegt, so entsteht eine in Sperrrichtung betriebene Halbleiterdiode. Trifft nun ein Photon auf den Kristall und wird absorbiert, dann werden Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband gehoben. Es entstehen Elektron-Loch-Paare und kurzzeitig kann ein Strom fließen. Dieser Strompuls kann nachgewiesen werden und über die Amplitude des Pulses ist es

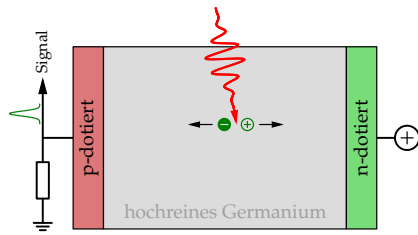


Abbildung 3.17. Wird ein Photon (rot) im hochreinen Germanium-Kristall absorbiert, entstehen Elektron-Loch-Paare (grün), und durch die angelegte Hochspannung kann kurzzeitig ein Strom fließen, der als Signal ausgelesen und elektronisch verstärkt wird.

möglich die Energie des detektierten Photons zu bestimmen. Das Prinzip ist in Abbildung 3.17 illustriert.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen kamen Detektoren vom Typ IGLET der Firma Ortec zum Einsatz, die direkt im Vakuum der EBIT betrieben wurden. Dadurch konnte auf ansonsten notwendige Vakuumfenster aus Beryllium verzichtet werden, die für Photonen im bei den Messungen betrachteten Energiebereich nahezu vollständig undurchlässig sind. Auf den Magnetformer wurde ein Aluminium-Filter montiert. Bei Photonenenergien von 500 bis 4000 eV wurden Energieauflösungen von 200 bis 300 eV erreicht.

MCP-Detektor

Eine Mikrokanalplatte (engl. micro-channel plate, MCP) besteht aus einem hochohmigen Material, in das durchgängige Kanäle eingebracht sind. Diese Kanäle besitzen einen gegenüber der Dicke der Platte sehr kleinen Durchmesser und sind gegenüber der Oberflächennormalen geneigt. Trifft ein Photon auf die Innenseite eines der Kanäle, dann werden Photoelektronen aus der Oberfläche freigesetzt. Eine entlang der Kanäle angelegte Hochspannung beschleunigt die Elektronen hin zur Plattenrückseite. Dabei treffen diese erneut auf die Kanalinnenseite und setzen weitere Elektronen frei. Dieser Prozess wiederholt sich mehrfach, wodurch ein einziges Photon eine große Zahl Elektronen erzeugt. Diese können, wenn sie auf eine Anode treffen als Strompuls nachgewiesen werden, wodurch ein Nachweis einzelner Photonen möglich wird. Das Funktionsprinzip ist in Abbildung 3.18 gezeigt.

An der FLASH-EBIT wurde ein MCP mit einem Durchmesser von 45 Millimetern direkt auf dem den Magneten umgebenden Wärmeschild montiert. Auf der Vorderseite des Detektors wurde ein Filter aus Aluminium angebracht, um Photonen niedriger Energie vom MCP abzuhalten und damit das Signal-zu-Rausch-Verhältnis zu verbessern. Im Gegensatz zu den anderen eingesetzten Fluoreszenzdetektoren besitzt der MCP-Detektor keinerlei Energieauflösung.

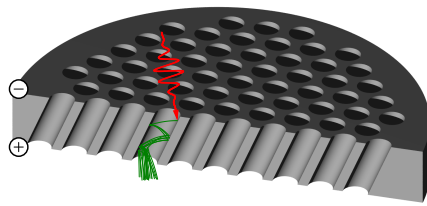


Abbildung 3.18. Trifft ein Photon (rot) auf die Innenseite eines der Kanäle in der Mikrokanalplatte und löst dort Photoelektronen (grün) aus dem Material, dann werden diese durch das anliegende elektrische Feld zur Rückseite der Platte hin beschleunigt. Dabei treffen sie erneut auf die Kanal-Innenoberfläche und setzen weitere Elektronen frei. Durch diese Vervielfachung wird ein Elektronenschauer erzeugt, der die Mikrokanalplatte rückseitig verlässt.

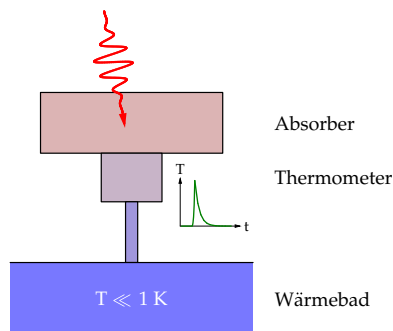


Abbildung 3.19. Ein Mikrokalorimeter besteht aus einem Absorber, an dem bei Absorption eines Photons (rot) mit Hilfe eines Thermometers ein Temperaturanstieg gemessen wird. Das Thermometer ist thermisch gut an den Absorber gekoppelt, steht aber über eine weniger leitfähige thermische Verbindung auch mit einem Wärmebad konstanter Temperatur in Kontakt.

Mikrokalorimeter

Trifft ein Photon auf einen Festkörper und wird absorbiert, und wird dessen Energie nicht anderweitig abgeführt, dann wird diese an das Kristallgitter des Festkörpers abgegeben. Dies äußert sich in einer Erhöhung der Temperatur. In einem Mikrokalorimeter wird dieser typischerweise sehr kleine Anstieg der Temperatur eines Absorbers nachgewiesen und dazu verwendet einzelne Photonen nachzuweisen. Dabei kann aus der Größe der Temperaturänderung auch auf die Energie des absorbierten Photons geschlossen werden. Die Komponenten eines typischen Mikrokalorimeters sind in Abbildung 3.19 gezeigt.

Während in Halbleiterdetektoren, wie zum Beispiel den oben beschriebenen Germanium-Detektoren, ein einfallendes Photon in Leitungselektronen konvertiert wird, wird ein Photon in einem Mikrokalorimeter in Phononen, die Quasiteilchen der quantisierten Gitterschwingungen, umgewandelt. Sowohl die Beförderung von Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband, als auch die Erzeugung von Phononen sind statistische Prozesse. So wie die Messung eines Stroms von Elektronen dem Zählen von Elektronen entspricht, entspricht die Messung einer Temperaturänderung dem Zählen von Phononen. Die erreichbare Energieauflösung eines Detektors, der auf einem solchen Zählprozess beruht, ist unüberwindbar limitiert durch die dem Zählen zugrunde liegende Poisson-Statistik. Wegen der um Größenordnungen kleineren Energie pro Phonon im Vergleich zu Elektronen und der daraus resultierenden höheren Anzahl Phononen, ist die erreichbare Auflösung eines Mikrokalorimeters deutlich besser als die eines Halbleiter-Detektors.

Bei den durchgeführten Messungen wurde das ein als XRS (engl. X-ray Spectrometer) bezeichnetes von der NASA entwickeltes Kalorimeter [93, 94] eingesetzt, das baugleich ist mit einem Instrument, das sich an Bord des später Suzaku getauften japanischen Röntgen-Weltraumteleskops ASTRO-E2 befindet. Es besitzt 32 einzeln auslesbare Pixel und kann Photonen mit Energien von 100 bis 12000 eV bei einem Auflösungsvermögen von etwa 1000 nachweisen [93]. Das XRS-Kalorimeter wurde am LLNL routinemäßig in Kombination mit der dortigen EBIT für spektroskopische Untersuchungen an einer Vielzahl verschiedener Spezies hochgeladener Ionen verwendet.

Gitterspektrometer

Weiterhin war ein Gitterspektrometer an der EBIT montiert, das üblicherweise für konventionelle Präzisionsspektroskopie am LLNL zum Einsatz kommt. Dieses wurde ausschließlich zu Diagnose-Zwecken eingesetzt, wofür es besonders geeignet war, da die Vielzahl abgebildeter gut aufgelöster Spektrallinien eine zuverlässige Einschätzung der in der Falle vorherrschenden Element- und Ladungszustandsverteilung zuließ.

Detektorenanordnung

Bei den beiden im Abstand eines Jahres durchgeführten Strahlzeiten wurden unterschiedliche Detektoren eingesetzt und die Anordnung der Detektoren an den Sichtzugängen zur Falle war verschieden. Die beiden Anordnungen sind in den Abbildungen 3.20 und 3.21 gezeigt. Bei der ersten Messkampagne im Jahr 2011 wurde ein Germanium-Detektor in Richtung des Polarisationsvektors der FEL-Photonen, in Photonenstrahlrichtung blickend rechts angebracht (0°). Das Mikrokalorimeter wurde am gegenüberliegenden Fallenzugang betrieben (180°), und das Gitterspektrometer befand sich am bezüglich des Polarisationsvektors um 45° gedrehten Zugangs oberhalb des Germanium-Detektors. Diese Anordnung ist wegen der durch die Polarisation der Photonen auftretenden Anisotropie der Fluoreszenz ungünstig (siehe auch Abschnitt 2.6). Die meisten Photonen werden bei den Übergängen 3C und 3D vertikal, unter 90° und 270° , abgestrahlt. Die wenigsten hingegen in horizontaler Richtung. Aus diesem Grund wurde die Belegung der Zugänge zur Falle für die zweite Messkampagne 2012 verändert. Der Germaniumdetektor und das Mikrokalorimeter wurden auf 45° beziehungsweise 135° versetzt. Das Gitterspektrometer wurde dem Mikrokalorimeter gegenüber unter 315° angebracht. Zusätzlich wurde ein weiterer Germaniumdetektor am ursprünglichen Ort des ersten Germanium-Detektors und der MCP-Detektor unter 270° hinzugefügt.

Das Mikrokalorimeter arbeitete 2011 nur zu Beginn der Messzeit fehlerfrei und lieferte deshalb erst 2012 verwertbare Fluoreszenzdaten. Der zweite Germani-

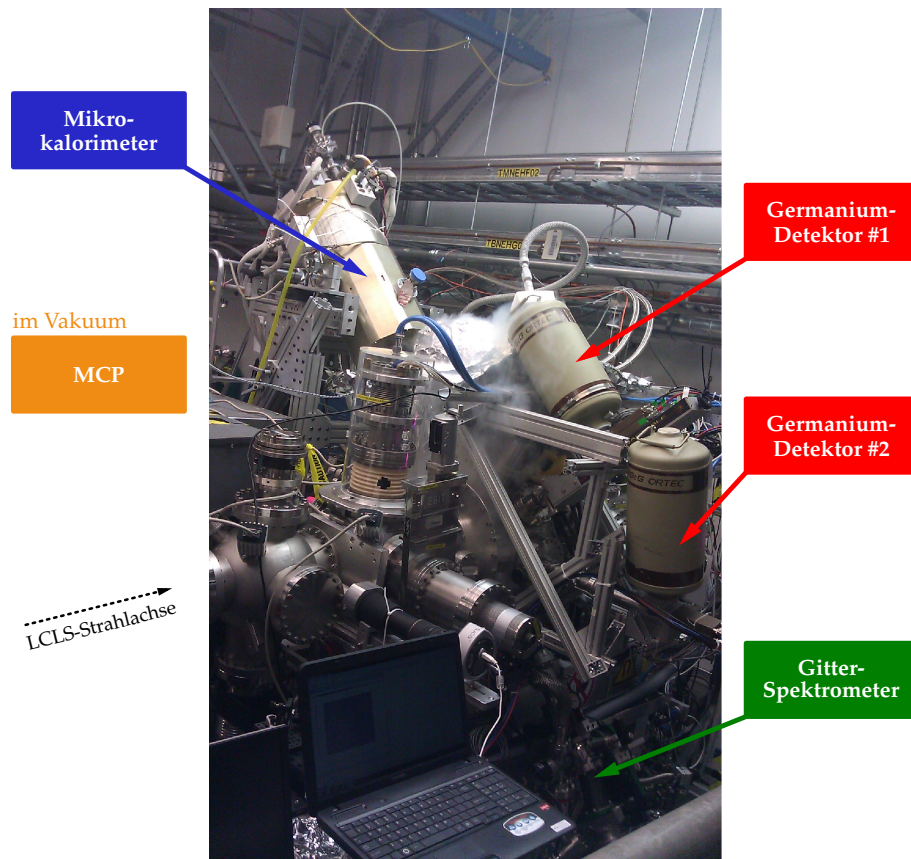


Abbildung 3.20. Die FLASH-EBIT bei LCLS im Jahr 2012 mit 5 angebrachten Fluoreszenz-Detektoren. Zu sehen sind zwei Germanium-Detektoren (rot), das Mikrokalorimeter (blau) und das Gitter-Spektrometer (grün). Nicht zu sehen ist der MCP-Detektor, der am unteren Zugang zur Falle im Vakuum montiert ist. Die Strahlachse die FEL und die Photonenflugrichtung sind mit einem gestrichelten Pfeil gekennzeichnet. (Foto: R. Steinbrügge)

umdetektor lieferte bei seinem Einsatz bei der zweiten Kampagne wegen starken elektronischen Rauschens keine Daten.

3.5 Herstellung des Überlapps von Ionenwolke und Photonenstrahl

Eine der Herausforderungen zu Beginn der Messungen war es, den vom FEL kommenden Photonenstrahl mit der Ionenwolke in der EBIT zum Überlapp zu bringen. Hierzu standen eine Reihe diagnostischer Werkzeuge zur Verfügung, die in Abbildung 3.22 gezeigt sind. Im Strahlengang des FEL befand sich ein um 45° zum Strahl geneigter Spiegel mit einer zentralen Bohrung, durch die der Strahl hindurch ging. Mit Hilfe einer Kamera konnte über diesen Spiegel entlang des Strahlengangs in

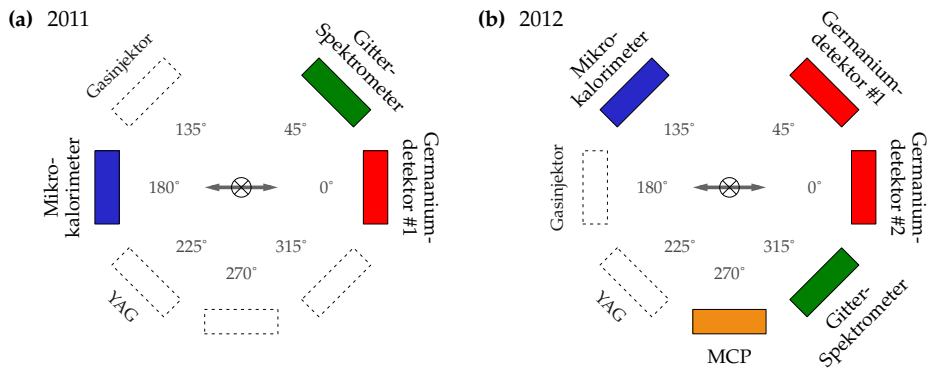


Abbildung 3.21. Die Anordnung der Fluoreszenz-Detektoren an den sieben Zugängen zum Fallenzentrum bei den beiden Messkampagnen in den Jahren 2011 (a) und 2012 (b). Der Photonenstrahl geht in die Blattebene hinein und die Polarisation ist als Doppelpfeil eingezeichnet. Zusätzlich zu den Detektoren sind die Positionen des Gasinjektionssystems und des Fluoreszenzschirms für das Fallenzentrum (YAG) angegeben.

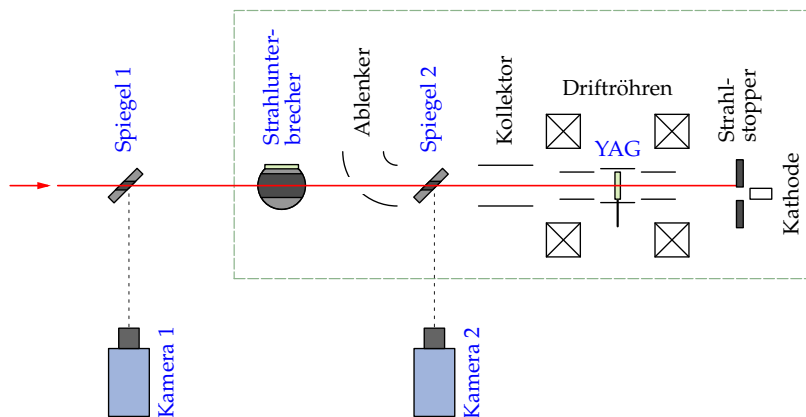


Abbildung 3.22. Um den notwendigen Überlapp von Photonenstrahl und Ionenwolke herzustellen, wird über zwei mit einer zentralen Bohrung versehene und um 45° zur Strahlachse geneigte Spiegel mit Kameras in Richtung Fallen-Zentrum geschaut. So können bei eingeschaltetem Photonenstrahl zwei Fluoreszenzschirme aus YAG betrachtet werden, von denen einer auf den Strahlunterbrecher montiert ist und ein weiterer genau ins Fallenzentrum gefahren werden kann. Alle Komponenten im gestrichelten grünen Rechteck sind gemeinsam am Gestell der FLASH-EBIT fixiert und können mit Hilfe der drei Maschinenfüße so bewegt werden, daß letztendlich der gewünschte Überlapp hergestellt wird.

Richtung EBIT geschaut werden.

Strahlabwärts war der weiter oben beschriebene Strahlunterbrecher (siehe Abschnitt 3.3) angebracht, der wie alle folgenden Komponenten fest am Gestell der EBIT montiert war und sich so zusammen mit dieser bewegte. Der Strahlunterbrecher konnte nun bei Bedarf in eine Stellung gebracht werden, in der der auf ihm angebrachte YAG-Kristall vom Photonenstrahl getroffen werden konnte. Mit der strahlaufrwärts befindlichen Kamera konnte auf diese Weise sichergestellt werden, daß die Photonen das SXR-Strahlrohr ungehindert verlassen und in die EBIT gelangen können.

Nach dem Unterbrecher passierte der Strahl einen weiteren Spiegel mit Bohrung, über den mit Hilfe einer weiteren Kamera axial in die EBIT geschaut werden konnte. Dieser Spiegel war bei der Messzeit im Jahr 2011 am zu dieser Zeit verwendeten elektrostatischen Ablenker (siehe Abschnitt 3.2) montiert. Um den Spiegel in den Strahlengang einzubringen war es notwendig, den Ablenker aus dem Strahlengang zu entfernen. Dadurch konnte es geschehen, daß bei der Justage des Strahls bei eingefahrenem Spiegel ein Überlapp von Photonen und Ionen erzielt werden konnte, bei anschließender Entfernung des Spiegels und Positionierung des Ablenkers, der Photonenstrahl jedoch diesen nicht mehr passierte und so das Fallenzentrum nicht erreichte. Außerdem war es wünschenswert, die Position des Ablenkers zur besseren Reproduzierbarkeit der Ionenextraktion nicht zu verändern. Diese Schwachpunkte wurden mit dem Einsatz eines neu konstruierten Ablenkers im Jahr 2012 behoben. Bei diesem ist der Spiegel getrennt vom eigentlichen Ablenker und kann frei in den Strahl und wieder heraus bewegt werden.

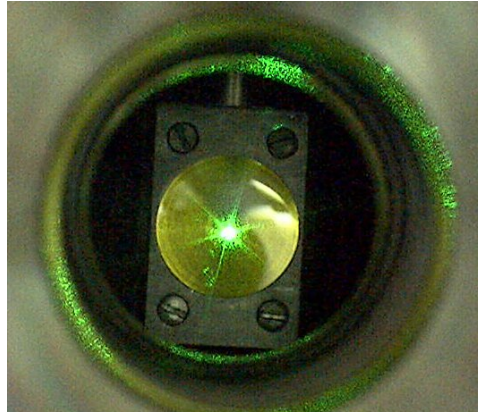
Bei LCLS stand ein optischer Justagelaser zur Verfügung, der innerhalb des SXR-Hutches die selben optischen Elemente passierte, wie der vom FEL kommende Strahl. In den Abbildungen 3.23 und 3.24 ist zu sehen, wie dieser jeweils auf einen der beiden Fluoreszenzschirme trifft. Mit Hilfe des Justagelasers war es möglich, die EBIT mit den motorisierten Füßen grob zu positionieren, ohne daß hierfür Licht vom FEL notwendig war. Die Ausrichtung konnte deshalb schon vor Beginn der eigentlichen Messzeit erfolgen. Ebenfalls in den Abbildungen 3.23 und 3.24 zu sehen ist die Abbildung des Röntgen-Strahls auf den selben Fluoreszenzschirmen. Der YAG-Schirm im Fallenzentrum konnte ebenfalls zur Abbildung des Elektronenstrahls verwendet werden. Dies ist ebenfalls in Abbildung 3.24 dargestellt. Auf diese Weise war die Position des Elektronenstrahls und damit auch der späteren Ionenwolke bekannt. Durch Einsatz der motorisierten Maschinenfüße wurde dann der Photonenstrahl mit der Position des Elektronenstrahls zur Deckung gebracht.

Üblicherweise stand die EBIT zu Beginn des Ausrichtungsvorgangs in einem Winkel zur Strahlachse, der verhinderte, daß Justagelaser oder FEL-Strahl überhaupt ins Fallenzentrum gelangen konnten. In diesem Fall wurde die Positionierung der EBIT systematisch so lange verändert, bis der Strahl auf dem YAG-Schirm im Fallenzentrum zu sehen war. Zur groben Orientierung dienten dabei auch diffuse

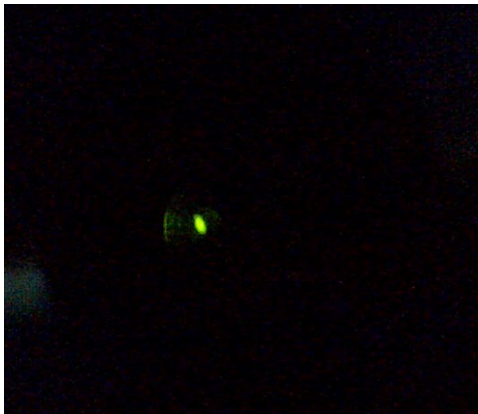
(a) optischer Laser, Beleuchtung an



(b) FEL, Beleuchtung an



(c) optischer Laser, Beleuchtung aus



(d) FEL, Beleuchtung aus

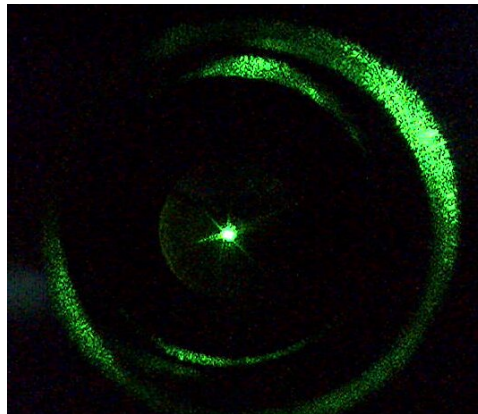


Abbildung 3.23. Auf dem Strahlstopper, der noch vor dem elektrostatischen Ablenker montiert ist, befindet sich ein Fluoreszenzschirm mit einem Durchmesser von 20 Millimetern. Mit diesem kann eine erste Grobausrichtung der EBIT erfolgen. Gezeigt ist die Abbildung des optischen Justagelasers (a,c) und des FEL (b,d) jeweils mit (a,b) und ohne (c,d) Hintergrundbeleuchtung.

Reflektionen der Justagelaser an den Innenseiten der Driftröhren. Eine weitere Methode wurde ebenfalls erfolgreich angewandt. Dabei wurde der YAG-Schirm um etwa 45° so gedreht, daß die dem Strahl zugewandte Seite von einem der Fluoreszenzdetektoren erfasst werden konnte. Traf nun Röntgen-Strahlung auf den Schirm, der teilweise aus Aluminium besteht, so wurde starke vom Aluminium ausgehende Fluoreszenz detektiert. Dies geschah auch dann, wenn der Schirm nur von wenig Röntgen-Strahlung aus den Ausläufern des Photonenstrahls getroffen wurde. Diese war mit Hilfe der Kameras auf dem Schirm nicht nachweisbar. Die EBIT konnte nun so bewegt werden, daß die Stärke der Fluoreszenz zunahm. Auf diese Weise wurde das Fallenzentrum in den Kern des Strahls hinein bewegt.

Die letzte Feinausrichtung der EBIT wurde jeweils durchgeführt, nachdem das erste Fluoreszenzsignal von hochgeladenen Ionen aufgenommen worden war. Hier-

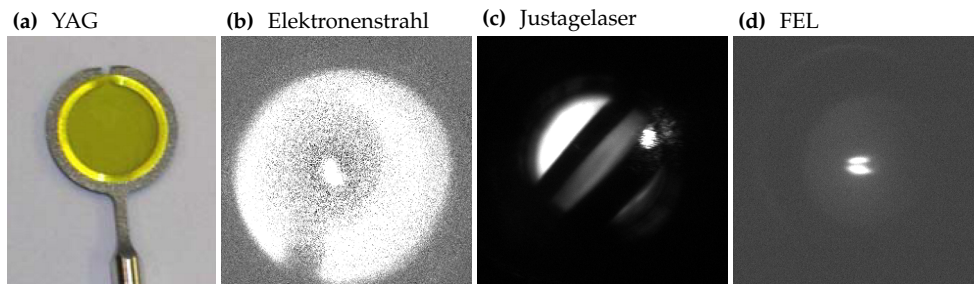


Abbildung 3.24. Mit Hilfe des YAG-Fluoreszenzschirms (a), der in die zentrale Driftröhre eingefahren werden kann, ist eine ortsauflösende Abbildung des Elektronenstrahls (b), eines optischen Justagelasers (c) und der vom FEL kommenden Röntgen-Photonen (d) möglich. Elektronenstrahl und Röntgen-Photonen bringen den Schirm zum Leuchten, der für einen optischen Laser transparent ist. Ein solcher kann durch drehen des Schirms auf dessen Halterung aus Aluminium sichtbar gemacht werden. (Foto in (a) aus: M. C. Simon [107])

bei wurde versucht, die Signalausbeute zu maximieren. Hierfür wurde der FEL auf die Energie einer der zu spektroskopierenden Linien, für gewöhnlich 3C, eingestellt und der SXR-Monochromator in nullter Ordnung betrieben. Unter diesen Bedingungen wurde die Fluoreszenzzählrate gemessen und durch systematische Bewegung der EBIT maximiert.

3.6 Untergrundunterdrückung durch Zeitkoinzidenz

Um Neon-artiges Eisen zu erzeugen, sind Elektronenstrahlenergien von mehr als dem Ionisationspotential von Natrium-artigem Eisen erforderlich. Dieses beträgt 489 eV [76, 114] (siehe Abbildung 3.25). Um eine möglichst hohe Ausbeute an Fe^{16+} -Ionen zu erreichen muss die Strahlenergie deutlich höher liegen, erfahrungsgemäß bei dem zwei- bis dreifachen. Bei den durchgeführten Experimenten lag sie zur Produktion dieses Ladungszustandes typischerweise bei etwa 800 eV. Nun tritt bei solchen Energien durch die unvermeidlich auftretende Elektronenstoßanregung Fluoreszenz mit bis zu eben dieser Energie auf. Wegen seiner unzureichenden Energieauflösung konnte der eingesetzte Germaniumdetektor den derart generierten Untergrund nicht vom gesuchten Fluoreszenzsignal unterscheiden. Wegen der im Vergleich zur gewollten resonanten Photoabsorption ungleich höheren Elektronenstoßrate war zu erwarten, daß das Fluoreszenzsignal deutlich schwächer ausfallen würde, als der Untergrund.

Es war notwendig ein Verfahren zur Diskrimination zwischen Signal und Untergrund anzuwenden. Dabei wurde ausgenutzt, daß LCLS Photonen nicht kontinuierlich sondern in kurzen Pulsen bereitstellt. Bei einer Wiederholrate von 120 Hz gelangte etwa alle 8 Millisekunden ein Puls in die EBIT. Bei Pulsdauern von lediglich 200 bis 2500 Femtosekunden fand deshalb die meiste Zeit keine Interaktion von Ionen und FEL-Photonen statt. Da die Lebensdauern der auftretenden angeregten

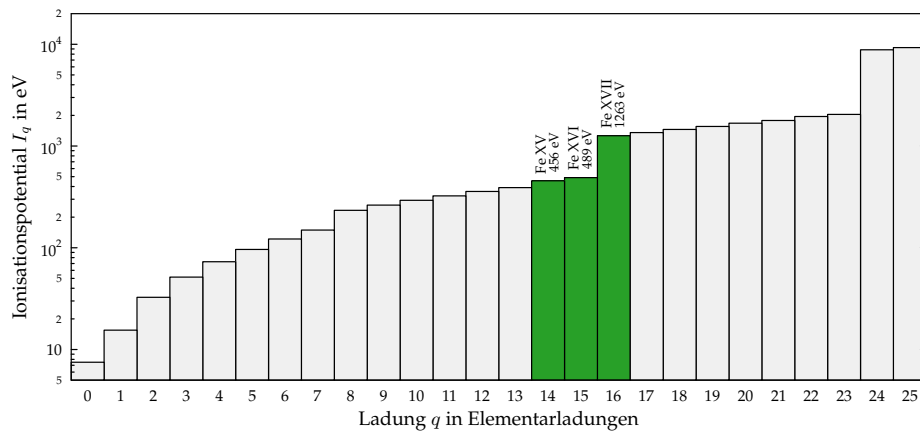


Abbildung 3.25. Dargestellt sind die Ionisationspotentiale aller Ladungszustände von Eisen von neutral ($q = 0$) bis vollständig ionisiert ($q = 26$). Zu erkennen sind die Sprünge im Ionisationspotential bei geschlossenen Schalen. Die beiden in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich behandelten Ladungszustände Fe^{15+} (Fe XVI) und Fe^{16+} (Fe XVII), sowie der Ladungszustand Fe^{14+} (Fe XV) sind grün hervorgehoben. Die gezeigten Potentiale stammen aus der Atomic Spectra Database [76].

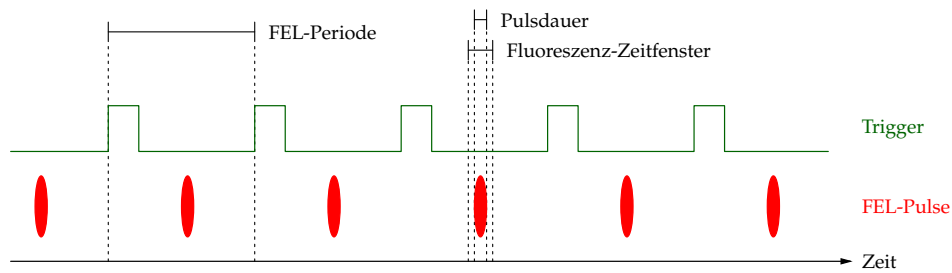


Abbildung 3.26. Bei der Verwendung eines gepulsten Lasers mit fester Periode kann ein periodisches Trigger-Signal (grün) mit einer festen Phasenbeziehung zu den Pulsen (rot) erzeugt werden. Sind die Lebensdauern der durch die Photonen angeregten Übergänge klein im Vergleich zur Periode, dann erfolgt jedwede Fluoreszenz innerhalb eines kleinen Zeitfensters um den Zeitpunkt des Pulses.

Niveaus weitaus kürzer waren als die Zeitaufösungen der verwendeten Detektoren, fand Fluoreszenz im Rahmen der möglichen Messgenauigkeit ausschließlich zeitgleich mit den FEL-Pulsen statt. Aus diesem Grund wurden die Ankunftszeiten aller detektierten Fluoreszenzphotonen relativ zu einem Triggersignal aufgezeichnet. Dieses Signal wurde von LCLS bereitgestellt und besaß die selbe Wiederholrate wie der FEL. Das Prinzip ist in Abbildung 3.26 illustriert. Es wurden nun nur solche Photonen als Signal betrachtet, die innerhalb eines kurzen Zeitfensters um die Ankunftszeit der Pulse herum detektiert wurden. Die breite des Fensters wurde bestimmt durch die Zeitaufösung des jeweiligen Detektors. In der späteren Datenauswertung konnten dann zusätzlich die außerhalb dieses Zeitfensters aufgenommenen Ereignisse zum Abzug des verbliebenen Untergrundes eingesetzt

werden.

Dieses Prinzip der Untergrundunterdrückung durch Zeitkoinzidenz wurde schon bei den ersten laserspektroskopischen Messungen mit der FLASH-EBIT angewandt [40].

3.7 Datenaufnahmesysteme

Während der Messungen trafen 120 mal pro Sekunde Photonen von LCLS auf Ionen in der EBIT und für jeden dieser Pulse mussten alle Signale von allen Fluoreszenzdetektoren erfasst und für die spätere Datenanalyse gespeichert werden. Zusätzlich musste eine Vielzahl weiterer sich von Puls zu Puls ändernder Parameter, wie zum Beispiel die Stellung des Monochromators oder die Intensität des Pulses, gespeichert werden. Hierzu wurde das LCLS-eigene Datenaufnahmesystem verwendet, wodurch die vorhandene Infrastruktur sowohl zur Datenerfassung als auch zur Datenverwaltung verwendet werden konnte.

Im SXR-Hutch standen Digitalisierer vom Typ Acquiris der Firma Agilent zur Verfügung. Diese besitzen eine Digitalisierungsrate von bis zu 8 Milliarden Werten pro Sekunde mit einer 10-Bit-Auflösung. Die Digitalisierung der Signale wurde mit jedem LCLS-Schuß neu gestartet. Die Pulse von den Germaniumdetektoren wurden ähnlich der Funktionsweise eines Speicheroszilloskops komplett digitalisiert. Für die Signale des MCP-Detektors wurde ein von SLAC entwickelter Zeitdigitalisierer verwendet, der die seit dem letzten FEL-Trigger vergangene Zeitspanne beim Eintreffen eines jeden Photons aufzeichnete.

Für die Erfassung sich nur von Schuß zu Schuß oder noch langsamer ändernder Parameter von LCLS- und SXR-Komponenten wurde EPICS (engl. Experimental Physics and Industrial Control System) verwendet. Es handelt sich dabei um ein Netzwerkprotokoll nebst dazugehöriger Software. EPICS erlaubt es, im Prinzip jede Komponente eines Experiments über ein konventionelles Rechnernetzwerk zu steuern und auszulesen. Da EPICS bei LCLS ohnehin zur Steuerung aller vorhandenen Elemente, vom Beschleuniger bis zu den Optikkomponenten im SXR-Hutch, verwendet wurde, wurden alle so verfügbaren Parameter von Seiten der LCLS-Kontrolle mitprotokolliert.

Während bei der ersten Messkampagne 2011 der SXR-Intensitätsmonitor direkt digitalisiert und per EPICS bereitgestellt wurde, war dies aus technischen Gründen bei der zweiten Kampagne 2012 nicht möglich. Es wurde stattdessen das Intensitätssignal ebenfalls per Acquiris-Digitalisierer erfasst.

Bei den zahlreichen Möglichkeiten die dieses System bietet war es jedoch nicht möglich, die von den Fluoreszenzdetektoren erhaltenen Signale während des Experiments in Echtzeit zu betrachten. Da dies allerdings unbedingt notwendig war, um die Fluoreszenzausbeute im Betrieb zu optimieren und das Funktionieren der laufenden Messung beurteilen und gegebenenfalls eingreifen zu können, wurde

parallel zum LCLS-System ein getrenntes Datenaufnahmesystem aufgebaut. Dieses ist weniger leistungsfähig im Hinblick auf die Menge und Vollständigkeit der verarbeiteten und gespeicherten Daten, erlaubt aber einen verzögerungsfreien Blick auf die eingehenden Daten.

Verwendet wurden hierfür MPA-3-Systeme der Firma FAST ComTec, Multi-Parameter-Datenaufnahmesystem mit bis zu 16 Kanälen, die in jeweils einem von drei möglichen Modi betrieben werden können. Der erste Modus wird als SVA (engl. Sampling Voltage Analyzer) bezeichnet und digitalisiert eine anliegende Gleichspannung im Bereich zwischen 0 und 10 V. Die Digitalisierung wird durch einen Trigger-Puls ausgelöst. Im zweiten, PHA (engl. Pulse Height Analysis) genannten Modus wird die Höhe eines eintreffenden Pulses digitalisiert. Die maximale Pulshöhe ist 10 V. Der dritte Modus dient zur Zeitmessung. Er wird deshalb als TDC-Modus (engl. Time-to-Digital Converter) bezeichnet. Die Zeitmessung wird durch einen eingehenden Puls gestartet und durch einen weiteren Puls gestoppt. Die verstrichene Zeit wird digitalisiert. Der Digitalisierungsbereich liegt dabei zwischen 50 ns und 20 μ s mit einer maximalen Zeitauflösung von 0,025 ns. In allen drei Modi beträgt die Digitalisierungsauflösung 13 Bit entsprechend 8192 Kanälen.

Die von einem MPA-3-System aufgenommenen Daten können in Echtzeit mit dem dazugehörigen Programm MPANT betrachtet werden. In diesem können ein- und zweidimensionale Spektren inklusive Koinzidenzbedingungen definiert werden. Die Aufzeichnung der Daten erfolgt einerseits in Form der bei der Datenaufnahme definierten Spektren, andererseits können aber auch alle eingehenden Rohereignisse unverarbeitet in einer als Listfile bezeichneten Datei gespeichert werden. Diese liegt anschließend zur weiteren Verarbeitung in einem eigenen Binärformat vor.

Eignung für die Messung von relativen Fluoreszenzraten

Die im MPA-3-System verwendeten TDCs besitzen jeweils einen Start- und einen Stop-Eingang. Ein Puls am Start-Eingang startet eine Zeitmessung, die dann durch einen Puls am Stop-Eingang beendet wird. Das gemessene Zeitintervall wird dann digitalisiert und an das Datenaufnahmesystem weitergeleitet. Für eine weitere Zeitmessung sind ein erneuter Start-Puls und ein erneuter Stop-Puls notwendig. Es ist also nicht möglich, die Ankunfts-Zeiten mehrerer Pulse relativ zu einem einzigen Start-Puls zu erfassen. Durch diese Einschränkung war das MPA-3-System für die Messung von Fluoreszenz-Intensitäten nicht geeignet. Hierfür ist es notwendig, alle von einem Photonen-Detektor nachgewiesenen Photonen zu erfassen. Wird, wie bei den MPA-3-TDCs, immer nur das erste Photon registriert, dann verhindern frühere Photonen den Nachweis späterer, wodurch das gemessene Signal verfälscht wird. Dies ist in Abbildung 3.27 illustriert. Insbesondere beeinflusst in einer solchen Konfiguration der durch Elektronenstoßanregung hervorgerufene Untergrund die gemessene Signalintensität.

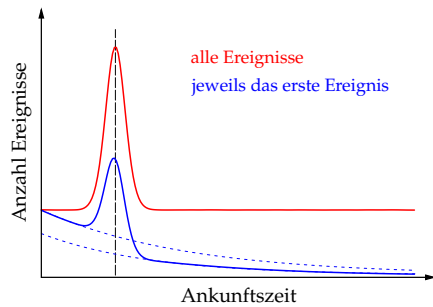


Abbildung 3.27. Bei einem zeitlich lokalisierten Signal mit einem zeitlich gleichverteilten Untergrund (rot), wird die Zeitabhängigkeit der Ereigniszählrate durch Erfassung des jeweils nur ersten Ereignisses nach Start der Zeitmessung verfälscht (blau). Ein konstanter Untergrund wird zu einem exponentiell abfallenden (blau gestrichelt). Die Stärke sowohl des gemessenen Signals als auch des gemessenen Untergrunds hängt sowohl von Signal- als auch Untergrundrate ab.

Das LCLS-eigene Datenaufnahmesystem digitalisiert innerhalb eines vorgegebenen Zeitfensters die Ankunftszeiten aller von den angeschlossenen Detektoren registrierten Photonen. Dies geschieht für den MCP-Detektor mit Hilfe eines Multi-Ereignis-TDCs und für die Germanium-Detektoren durch die komplette Digitalisierung des Signals. Die beschriebene Signalverfälschung tritt nicht auf. Deshalb wurden die im nächsten Kapitel beschriebene Datenauswertung ausschließlich basierend auf den Daten des LCLS-Datenaufnahmesystems durchgeführt. Die Daten des MPA-3-Systems dienten nur zur einfachen und schnellen Kontrolle während der Durchführung des Experiments.

Kapitel 4

Datenauswertung

In diesem Kapitel wird beschrieben, wie aus den während des Experiments aufgezeichneten Rohdaten Spektren gewonnen wurden. Im ersten Abschnitt wird die Extraktion der Daten aus den Ereignislisten erläutert. Im zweiten Abschnitt wird auf die einzelnen Verarbeitungsschritte von den Daten zum Spektrum eingegangen. Zum Schluß wird die durchgeführte Energiekalibration mit Hilfe Wasserstoff-artiger Ionen betrachtet.

4.1 Datenreduktion

Die vom MPA-3-System aufgenommenen Daten lagen sowohl in Form der während des Experiments in MPANT generierten Spektren vor, als auch als Listfiles. Diese konnten mit Hilfe der hierfür entwickelten Software-Bibliothek „lualst2“ in Einzelereignisse zerlegt, vorselektiert und in Textdateien konvertiert werden, die dann ihrerseits mit weiterer Software verarbeitet werden konnten. Die Bibliothek „lualst2“ ist eine als Modul für die Programmiersprache Lua [66] umgesetzte Neuimplementierung des andernorts beschriebenen Programms „RUNLUALST“ [12]. Da nicht alle notwendigen Parameter, wie zum Beispiel die gemessene Intensität jedes einzelnen Schusses ins MPA-3-System eingespeist werden konnte, wurden diese sich maximal mit einer Frequenz von 120 Hz ändernden Werte auf den SXR-Kontrollrechnern erfasst und als Textdatei exportiert. Die Zeitstempel der Dateien wurden dann zur Synchronisation verwendet.

Die vom LCLS-Datenaufnahmesystem erfassten Daten lagen in Form einer Reihe von Ereignislisten in sogenannten XTC-Dateien vor. Diese wurden von der Datenverarbeitungsinfrastruktur bei LCLS in Dateien vom Typ HDF5 [51] umgewandelt. Diese lagen auf den Rechnern des SLAC zur weiteren Verarbeitung bereit. Mit Hilfe von in der Programmiersprache Python [96] geschriebenen Skripten wurden direkt auf den dazu vom SLAC zur Verfügung gestellten Rechnern die für die weitere Auswertung relevanten Daten herausgefiltert und ebenfalls in Textdateien konvertiert. Dies ist schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt.

Die von den Acquiris-Digitalisierern erfassten Signale enthielten die aufgezeichneten Pulse als zeitabhängig gemessene Amplituden. Um aus den Signalen vom Germaniumdetektor Ereignisse zu rekonstruieren, wurden die aufgezeichneten Signalverläufe bereits beim Konvertieren der HDF5-Dateien nach Pulsen durchsucht. Ein Puls wurde dadurch erkannt, daß die Amplitude eine voreingestellte Schwelle überschritt, die so gewählt wurde, daß sie knapp über dem im Signal enthaltenen Rauschen lag. Ab diesem Zeitpunkt wurden alle folgenden Amplituden aufsummiert. Wurde eine weitere, höher liegende Schwelle überschritten, dann wurde der betrachtete Signalabschnitt als echter Puls eingestuft. Die Amplituden wurden dann über ein vorgegebenes Zeitfenster, gemessen von der Überschreitung der ersten Schwelle an, aufsummiert. Diese Summe wurde dann als Pulsamplitude interpretiert. Wurde die zweite Schwelle innerhalb eines vordefinierten Zeitfensters nach der ersten Schwelle nicht überschritten, dann wurde der potentielle Puls verworfen. Bei der zweiten Kampagne ebenfalls per Acquiris erfassten Intensitätssignal wies der aufgezeichnete Verlauf eine stark oszillierende Struktur auf. Als Intensität interpretiert wurde die aufsummierte erste Halbschwingung dieses Signals.

Die weitere Verarbeitung sowohl der MPA-3- als auch der LCLS-Daten erfolgte mit Hilfe von Python-Skripten. Wegen der weiter oben beschriebenen Unzulänglichkeiten des MPA-3-Systems bei der Messung von relativen Signalaraten, wegen der Beschränkung auf das jeweils erste detektierte Photon, wurden hauptsächlich die Daten des LCLS-Systems herangezogen.

4.2 Gewinnung von Spektren

Um aus den aufgezeichneten Ereignissen Spektren zu erhalten wurden sie als Punkte in einem vieldimensionalen Volumen aufgefasst. Die Koordinaten in diesem Volumen waren Monochromatorstellung, Ankunftszeit des Photons relativ zum FEL-Trigger und Intensität des FEL-Pulses. Im Fall der energieauflösenden Detektoren kam noch die Energie des detektierten Photons hinzu. Dieses wurde dann nach Ankunftszeit der Photonen und im Fall des Germaniumdetektors nach Photonenenergie unterteilt.

Zeitkoinzidenz

Da die Ankunftszeiten aller Fluoreszenzphotonen relativ zum FEL-Trigger bekannt waren, konnte das in Abschnitt 3.6 beschriebene Verfahren zur Untergrundunterdrückung umgesetzt werden. Dies ist in Abbildung 4.2 illustriert. Die Zeitauflösung betrug beim Germaniumdetektor etwa 180 Nanosekunden. Deshalb wurden nur Photonen innerhalb eines 600 Nanosekunden breiten Zeitfensters um die Ankunftszeit des FEL-Pulses herum als potentielles Signal betrachtet (siehe Abbildung 4.3). Bei einer LCLS-Puls-Periode von etwa 8 Millisekunden war eine Untergrundunter-

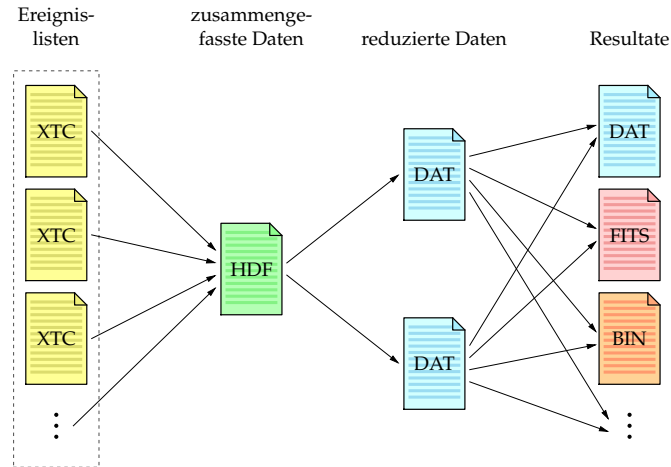
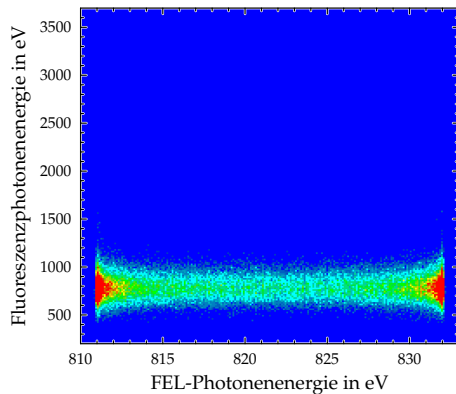


Abbildung 4.1. Während des laufenden Experimentierbetriebs wurden alle in das LCLS-Datenaufnahmesystem eingespeisten Daten in Ereignislisten (XTC-Dateien, gelb) geschrieben. Dabei wurden jeweils verschiedene Daten in unterschiedliche Dateien geschrieben. Nach Beendigung einer Messung wurden die zugehörigen Ereignislisten zu einer einzigen Datei im HDF5-Format (grün) kombiniert, die in einem weiteren Schritt zu einfachen Textdateien (blau) reduziert wurden, die nur noch die für die weitere Auswertung benötigten Informationen enthielten. Diese konnten dann zu den endgültigen Resultaten kombiniert werden.

(a) ohne Zeitkoinzidenz



(b) mit Zeitkoinzidenz

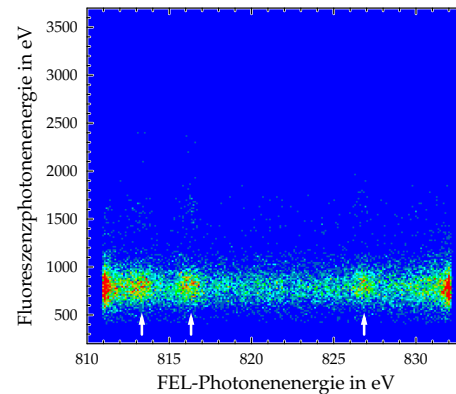


Abbildung 4.2. Das durch Elektronenstoßanregung hervorgerufene Untergrundsignal verdeckt bei einem Germaniumdetektor das durch den FEL hervorgerufene Fluoreszenzsignal (a). Betrachtet man nur Photonen, die innerhalb eines 600 Nanosekunden breiten Zeitfensters um die Ankunftszeit der FEL-Photonen herum detektiert wurden, dann treten die gesuchten Resonanzen zutage (b). Auf der horizontalen Achse ist jeweils die Energie der FEL-Photonen aufgetragen; auf der vertikalen Achse die Energie der detektierten Photonen. Die drei deutlichsten Resonanzen sind mit weißen Pfeilen markiert.

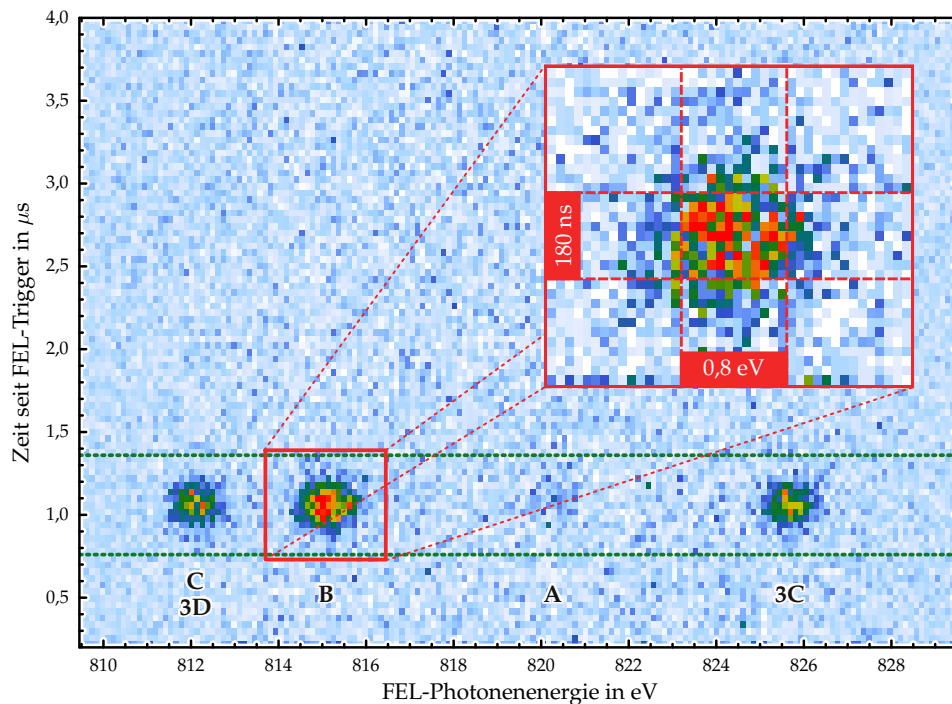


Abbildung 4.3. Ein typisches Spektrum. Aufgetragen sind auf der horizontalen Achse die FEL-Photonen-Energie und auf der vertikalen Achse die Zeit seit dem von LCLS zur Verfügung gestellten Triggersignal, das die Zeitmessung etwa $1 \mu\text{s}$ vor dem Eintreffen der FEL-Photonen startet. Die Farbe kodiert die Fluoreszenzzählrate pro Zeit- und Energieeinheit von 0 (weiß) bis 15 (rot) in $\text{Hz } \mu\text{s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$. Die enthaltenen Resonanzen von Fe XVII (3C, 3D) und Fe XVI (A, B, C) sind beschriftet. Eingezeichnet ist das 600 ns breite Zeitfenster (grün gestrichelt), innerhalb dessen Fluoreszenz als koinzident mit der Anregung betrachtet wurde. Der rote Kasten markiert Resonanz B und die dazugehörige vergrößerte Ansicht zeigt die erreichte Energie- und Zeitauflösung von 0,8 eV und 180 ns.

drückung um einen Faktor von ungefähr 14000 möglich. Alle Photonen außerhalb des Koinzidenzfensters waren Untergrundergebnisse. Auf diese Weise konnte der Untergrund mit hoher Genauigkeit mitgemessen werden und wurde vom potentiellen Signal abgezogen. Das selbe Verfahren konnte auch mit dem MCP-Detektor durchgeführt werden. Die Zeitauflösung war hier mit etwa 2 Nanosekunden noch deutlich höher. Mit einem Zeitfenster von 10 Nanosekunden Breite beträgt der Faktor, mit dem Untergrund unterdrückt wird, etwa 800000.

Mehrfach-Photonen-Nachweis

In den vom Germaniumdetektor aufgenommenen und nach der Energie der Fluoreszenzphotonen aufgelösten Spektren sind, wie in den Abbildungen 4.4 und 4.5, neben dem dem Signal und dem durch Elektronenstoßanregung hervorgerufenen Untergrund weitere Resonanzen erkennbar. Diese Resonanzen treten bei den sel-

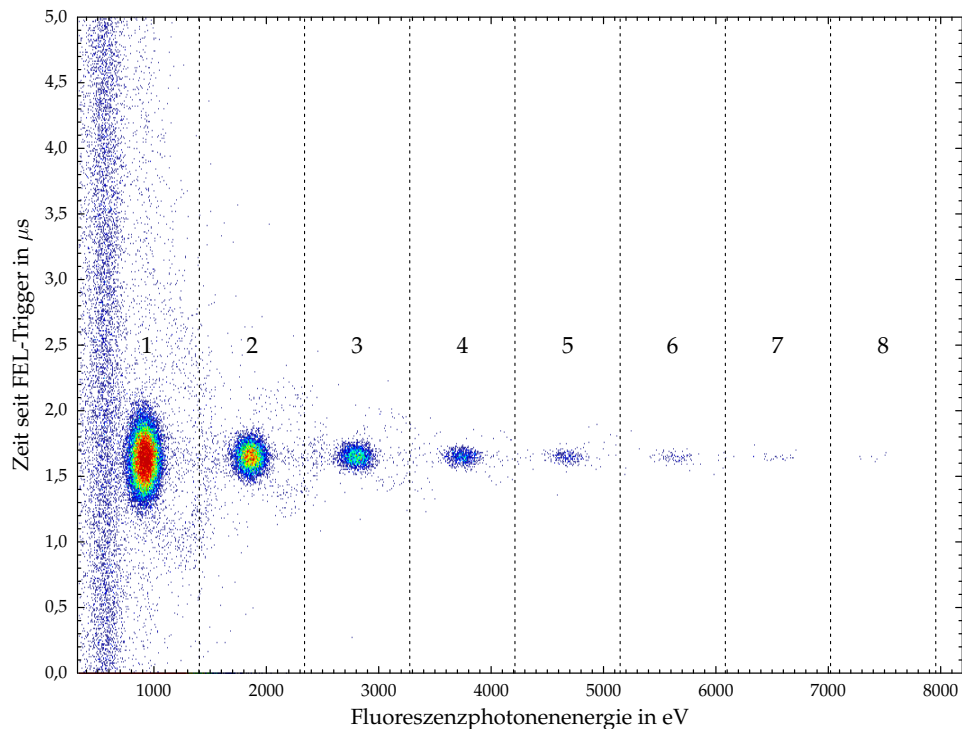


Abbildung 4.4. Ein zeitaufgelöstes Germaniumdetektorspektrum. Auf der horizontalen Achse ist die gemessene Energie der Fluoreszenzphotonen aufgetragen. Die vertikale Achse zeigt die Zeit seit dem FEL-Trigger. Die vertikalen gestrichelten Linien unterteilen das Spektrum in Streifen gleicher Breite in der Photonenenergie. In jedem Streifen liegt eine Resonanzstruktur. Diese entsprechen unterschiedlichen Anzahlen vom Detektor zeitgleich nachgewiesener Photonen. Diese Zahlen sind in den Streifen angegeben. Die gezeigten Daten wurden aufgenommen, als Neon in die EBIT injiziert wurde. Der SXR-Monochromator wurde in nullter Ordnung betrieben, um die Signalausbeute zu maximieren, und die FEL-Energie betrug konstant etwa 930 eV. Das senkrechte durchgehende Band am linken Rand stammt vom durch Elektronenstoßanregung hervorgerufenen Untergrund.

ben FEL-Photonenenergien auf wie die gesuchte Fluoreszenz und befinden sich bei Fluoreszenzphotonenenergien, die ein Vielfaches der Resonanzenergie sind. Sie sind außerdem dann stärker, wenn auch die gesuchte Fluoreszenz stärker ist.

Dieses Phänomen rührt daher, daß die Lebensdauer der durch die FEL-Photonen angeregten Zustände weitaus kleiner ist als die Zeitauflösung des verwendeten Detektors. Aus Sicht des Detektors werden alle in der Falle generierten Fluoreszenzphotonen zeitgleich abgestrahlt. Es besteht nun eine gewisse Wahrscheinlichkeit, daß der Detektor nicht nur von einem sondern von mehreren Photonen getroffen wird. Da der Detektor nur die auf ihm deponierte Energie misst, kann er mehrere gleichzeitig eintreffende Photonen nicht von einem einzigen Photon höherer Energie unterscheiden. Deshalb entsprechen die Strukturen einfacher Resonanzenergie einzelnen Photonen, doppelter Resonanzenergie zwei Photonen und ganz allge-

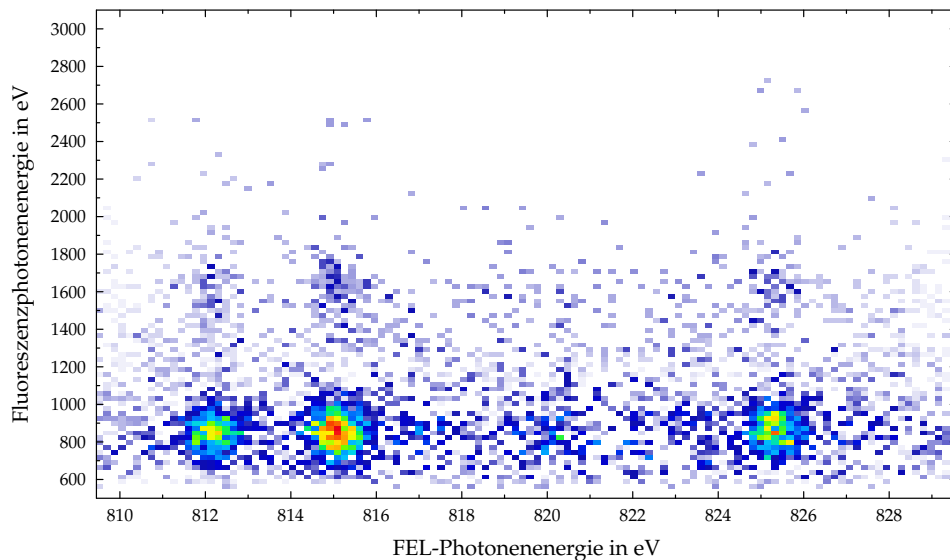


Abbildung 4.5. Ein zweidimensionales Spektrum, das mit einem der Germaniumdetektoren aufgenommen wurde. Auf der horizontalen Achse ist die Energie der vom FEL kommenden Photonen und auf der vertikalen Achse die Energie der detektierten Fluoreszenzphotonen aufgetragen. Die sichtbaren Resonanzen entsprechen denen aus Abbildung 4.3. Das gezeigte Spektrum wurde auf die bei jeder Energie zugebrachten Zeitspanne normiert und Untergrundphotonen wurden abgezogen. Die verbliebene, als horizontales Band erkennbare, Untergrundstruktur stammt daher, daß nach dem Abzug sowohl ins Positive als auch ins Negative schwankende Werte resultieren, die mit der gewählten Farbskala weiterhin sichtbar bleiben.

mein solche k -facher Energie k Photonen. Unter den speziellen Bedingungen des durchgeführten Experiments konnten mit dem Germaniumdetektor auf diese Weise die bei jedem FEL-Puls zum Detektor gelangenden Photonen eindeutig gezählt werden. In der Datenauswertung wurde dies berücksichtigt, indem jedes detektierte Photonenereignis als entsprechende Anzahl Photonen verrechnet wurde. Da das Hauptziel die Messung des Verhältnisses zweier Linienintensitäten war, war die Fähigkeit die detektierten Photonen zu zählen unabdingbar.

Der neben dem Germaniumdetektor eingesetzte MCP-Detektor besaß keine Energieauflösung und so konnten damit keine Mehrfachereignisse detektiert werden. Bei der weitaus größeren Fläche des Detektors und den resultierenden höheren Zählraten sind aber noch mehr Mehrfachereignisse zu erwarten. Es wurde in der Datenauswertung versucht, die Tatsache auszunutzen, daß eine sehr große Zahl FEL-Schüsse mit vergleichbaren Bedingungen erfolgte. Durch Anwendung von Poisson-Statistik [77] auf die gemittelten Ereignisse pro Schuß sollte die mittlere tatsächliche Anzahl detektierter Photonen rekonstruiert werden. Treffen im Mittel $\langle k \rangle$ Fluoreszenzphotonen pro Schuß des FEL auf den Detektor, dann ist die

Wahrscheinlichkeit, daß bei einem konkreten Schuß k Photonen auftreffen

$$p_k = \frac{\langle k \rangle^k}{k!} e^{-\langle k \rangle} . \quad (4.1)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß kein einziges Photon auf den Detektor trifft, ist

$$p_0 = e^{-\langle k \rangle} \quad (4.2)$$

und die experimentell bestimmte Anzahl Ereignisse pro Schuß n ist identisch zur Wahrscheinlichkeit, mindestens ein Photon nachzuweisen.

$$n = 1 - p_0 = 1 - e^{-\langle k \rangle} \quad (4.3)$$

Daraus folgt

$$\langle k \rangle = -\ln(1 - n) . \quad (4.4)$$

Auf diese Weise sollte sich die mittlere Anzahl vom MCP detektierter Photonen gewinnen lassen. Es stellte sich jedoch heraus, daß die so erhaltenen Zählratenverhältnisse inkompatibel waren mit den mit Hilfe des Germaniumdetektors gewonnenen Werten. Es wurde geschlußfolgert, daß die Poisson-Statistik in der aufgeführten Form nicht anwendbar ist. Eine wahrscheinliche Ursache hierfür ist, daß die Nachweiseffizienz von der Anzahl Photonen abhängt. Dies ist realistisch, da mehrere Photonen eine höhere Energie deponieren als ein einzelnes und damit ein stärker ausgeprägtes Signal generieren. Es musste festgestellt werden, daß der MCP-Detektor für Intensitätsmessungen nicht geeignet ist. Diese erfolgten deshalb ausschließlich mit den vom Germaniumdetektor erfassten Daten.

Handhabung von Intensitätsfluktuationen

Bedingt durch die statistische Natur des SASE-Prozesses (siehe auch Abschnitt 2.4) besitzt der FEL nicht nur ein Spektrum mit einer Bandbreite in der Größenordnung von 20 eV, sondern das Spektrum jedes einzelnen Schusses weist auch noch eine Unterstruktur auf [2]. Diese Strukturen besitzen Breiten von weniger als 1 eV. Der SXR-Monochromator schnitt nun aus dem Spektrum jedes Schusses einen Teil heraus, der dann in die EBIT gelangte, wie in Abbildung 3.7 dargestellt. Dadurch schwankte die Anzahl der in der EBIT mit den Ionen wechselwirkender Photonen stark. Zusätzlich dazu wies die mittlere Strahlintensität eine Abhängigkeit von der angefahrenen Photonenenergie auf. Diese stammte einerseits von der energieabhängigen Ausgangsintensität des FEL, war aber teilweise auch bedingt durch das nicht hundertprozentig akkurate Nachfahren des Monochromators. Da Fluoreszenzraten unterschiedlicher Resonanzen verglichen werden sollten, war eine Korrektur der registrierten Zählraten gegen diese Schwankungen unbedingt notwendig.

Zu diesem Zweck kam der in Abschnitt 3.1, Unterabschnitt „Der SXR-Hutch“ beschriebene Intensitätsmonitor zum Einsatz. Die Intensität jedes einzelnen Schusses

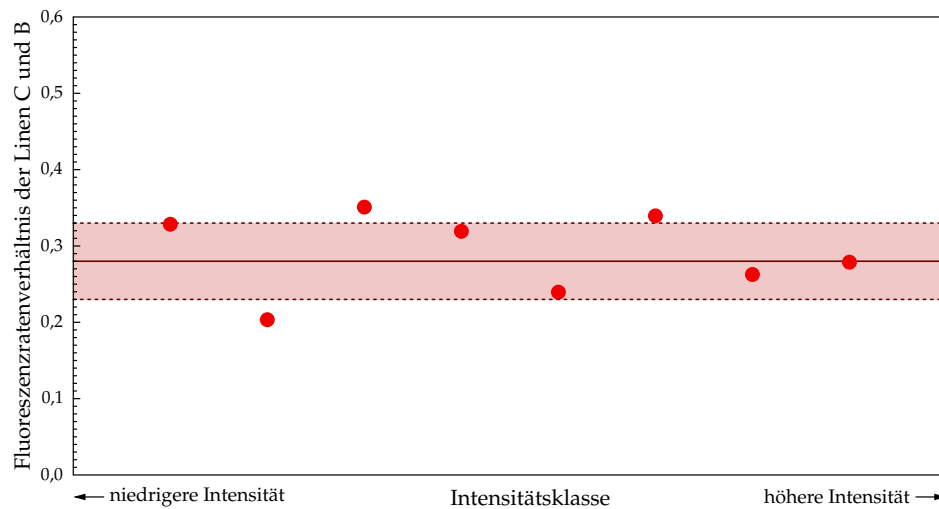


Abbildung 4.6. Gezeigt ist das Verhältnis der Fluoreszenzraten von C und B in einem Spektrum in Abhängigkeit von der Intensität, gemessen mit dem SXR-Intensitätsmonitor. Die Photonenergebnisse wurden in Intensitätsklassen einsortiert und dann nach Klassen getrennt weiterverarbeitet. Die Datenpunkte entsprechen Spektren niedriger Intensität links und hoher Intensität rechts. Das rote Band kennzeichnet den Mittelwert und den dazugehörigen Fehlerbereich.

wurde damit erfasst. Da das vom Monitor gelieferte Intensitätssignal nicht proportional zur tatsächlichen Intensität war, war keine direkte Korrektur der fertigen Spektren möglich. Da das Signal aber eine monotone Abhängigkeit von der Intensität aufwies, konnte ein anderer Ansatz gewählt werden, der darin bestand, alle Ereignisse in Intensitätsklassen aufzuteilen und einzelne Spektren jeweils ausschließlich aus den Daten einer Intensitätsklasse zu erzeugen. So wurde durch Selektion der Daten der Fall einer konstanten Intensität nachgeahmt. Die Intensitäten innerhalb eines solchen Spektrums konnten miteinander verglichen werden. Es war dementsprechend möglich, Intensitätsverhältnisse zu gewinnen.

In Abbildung 4.6 ist das für verschiedene Intensitätsklassen ermittelte Fluoreszenzratenverhältnis zweier Linien von Fe XVI gezeigt. Das Verhältnis ist innerhalb der statistischen Fehler unabhängig von der Intensität, obwohl beide Linien einzeln um einen Faktor 3,6 verschiedene Zählraten aufweisen. Es wurde deshalb geschlossen, daß die der Fluoreszenz zugrundeliegenden Prozesse im Rahmen der Messgenauigkeit keine nicht-lineare Intensitätsabhängigkeit aufwiesen. Die Unterteilung in Intensitätsklassen sollte es einem dementsprechend tatsächlich gestatten, Fluoreszenzratenverhältnisse zu ermitteln.

Fehlerfortpflanzung

Zur möglichst vollständigen Behandlung der auftretenden statistischen Fehler wurde so verfahren, daß alle von einem Detektor aufgenommenen Rohereignisse vor

der Weiterverarbeitung in mehrdimensionalen Histogrammen gesammelt wurden. Das gleiche geschah mit den als Ereignis behandelten Schüssen des FEL. Bis zu diesem Punkt sind alle Werte ganzzahlig und das Resultat von Zählvorgängen. Bevor diese Werte mit einander verrechnet wurden, wurde jedem Histogrammeintrag die Wurzel der dort verzeichneten Anzahl Ereignisse als statistischer Fehler zugeordnet. Bei allen weiteren Verarbeitungsschritten wurden den sich ergebenden Werten passende Fehler mit Hilfe der Gaußschen Fehlerfortpflanzung [77] zugeordnet.

Implementierung der Datenverarbeitung

Um die oben beschriebenen Schritte von den Rohdaten zu den fertigen Spektren auszuführen, wurden Skripte in der Programmiersprache Python [96] geschrieben. Diese verwendeten die Bibliotheken „NumPy“ [91] und „SciPy“ [103] zur Datenrepräsentation und -manipulation. Dabei wurde wie im Folgenden dargestellt vorgegangen.

1. Es wurden drei zweidimensionale Histogramme angelegt, bei denen die eine Dimension die Monochromatorstellung und die andere die Intensität darstellte. In eines wurden alle Signalereignisse – also solche, die innerhalb des festgelegten Zeitkoinzidenzfensters lagen – eingetragen, wobei beim Germaniumdetektor die gemessene Photonenenergie dazu verwendet wurde, die Anzahl gleichzeitig detektierter Photonen zu ermitteln und genau so viele Ereignisse zu verzeichnen. In das zweite Histogramm wurden alle Ereignisse eingetragen, die außerhalb des Zeitkoinzidenzfensters lagen und deshalb als Untergrundeereignisse aufgefasst wurden. In das dritte Histogramm wurde für jeden Schuß des FEL ein Ereignis eingetragen.
2. Danach wurde für das Signal- und das Untergrundhistogramm jeweils ein weiteres Histogramm gleicher Dimensionierung angelegt, indem aus ihnen kanalweise die Wurzel gezogen wurde. Die neuen Histogramme enthielten so für jeden Kanal eine Fehlerangabe.
3. Untergrundhistogramm und dazugehöriger Fehler wurden mit dem Verhältnis von Zeitkoinzidenzfensterbreite zu FEL-Periodendauer multipliziert.
4. Der Untergrund wurde vom Signal abgezogen. Die Fehler wurden kanalweise zur Wurzel aus der Summe der Quadrate.
5. Das korrigierte Signal und der dazugehörige Fehler wurden kanalweise durch die jeweilige Anzahl Schüsse geteilt.
6. Das resultierende Histogramm samt Fehler wurden in die Intensitätsklassen aufgespalten. Aus den zweidimensionalen Histogrammen wurden so eindimensionale Spektren für jede Intensitätsklasse.

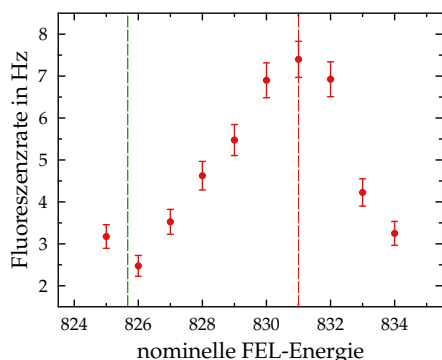


Abbildung 4.7. Aufgetragen ist die mit einem Germaniumdetektor gemessene Fluoreszenzrate in Abhängigkeit von der nominellen FEL-Energie, beim Betrieb des Monochromators in nullter Ordnung. Zu sehen ist die Resonanz 3C. Die Energie maximaler Zählrate ist mit einer senkrechten gestrichelten roten Linie markiert. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit gemessene Position der Linie ist als grüne gestrichelte Linie angedeutet. Die Differenz beider Energien beträgt mehr als 5 eV.

7. Zur Bestimmung von Linienverhältnissen wurden die Einzelspektren in Dateien ausgegeben und getrennt ausgewertet.
8. Die Einzelspektren wurden unter Beachtung der Fehlerfortpflanzung zu einem einzigen Spektrum aufsummiert. Dieses wurde in eine Datei ausgegeben und weiter ausgewertet.

4.3 Energiekalibration

Die Abtastung der FEL-Photonenenergien erfolgte über die kontinuierliche Veränderung des Gitterneigungswinkels am SXR-Monochromator und das gleichzeitige Nachfahren der Beschleunigerenergie. Die jeweils aktuelle Stellung des Monochromators wurde vom Datenaufnahmesystem erfasst. Dabei wurde jedoch nicht die aktuelle Photonenenergie aufgezeichnet, sondern eine vom gemessenen Gitterneigungswinkel abgeleitete willkürliche Größe. Es war deshalb notwendig, den Zusammenhang dieser Größe mit den Photonenenergien zu ermitteln, um die gewonnenen Spektren mit einer entsprechenden Achse zu versehen.

Zur Orientierung beim Auffinden der gesuchten Resonanzen diente eine bereits vorhandene grobe Kalibration des FEL. In Abbildung 4.7 ist die mit einem Germaniumdetektor gemessene Fluoreszenzrate, mit Eisen in der Falle, als Funktion der nominellen FEL-Energie aufgetragen. Der SXR-Monochromator wurde dabei in nullter Ordnung betrieben. So waren Photonenenergie und Energieauflösung nur durch den FEL bestimmt. Es zeigte sich, daß die durch die Beschleuniger- und Undulatorparameter eingestellte nominelle Energie von der tatsächlichen Energie um mehrere Elektronenvolt abweicht. Bei der zu erwartenden Energieauflösung des SXR-Monochromators von unter 1 eV war eine bessere Kalibration unbedingt erforderlich.

Zum Zweck einer solchen Kalibration wurde 1,1,1,2-Tetrafluorethan ($C_2H_2F_4$) anstelle von Eisenpentacarbonyl in die EBIT injiziert, das bei Zimmertemperatur gasförmig ist. Auf diese Weise wurde Fluor bereitgestellt und bei Elektronenstrahl-

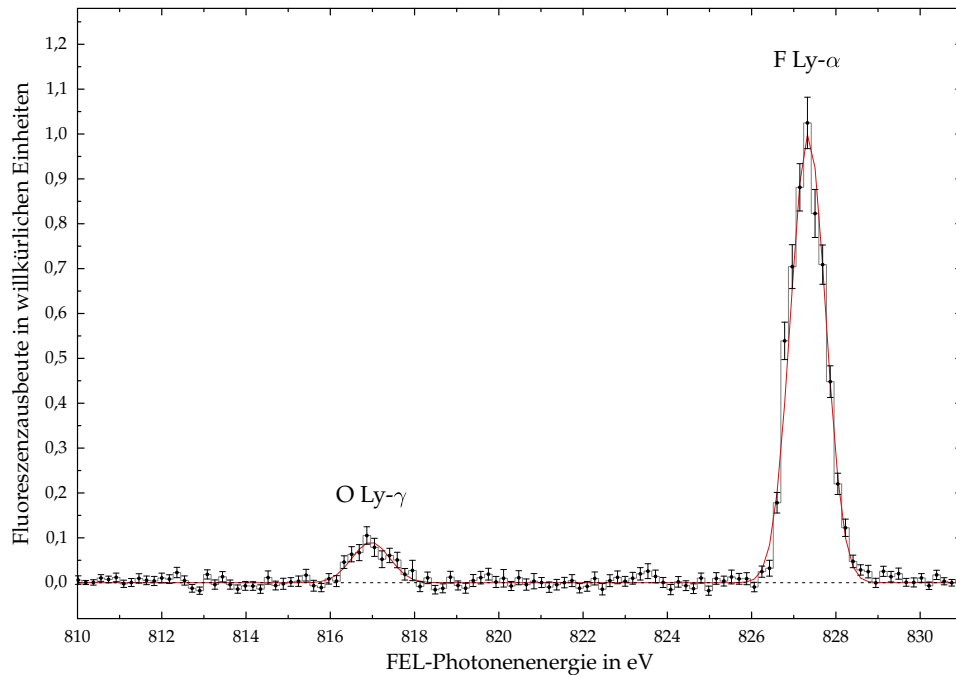


Abbildung 4.8. Ein Kalibrationsspektrum, aufgenommen bei der ersten Messkampagne mit dem Germaniumdetektor. Enthalten sind zwei Linien Wasserstoff-artiger Ionen. Auf der horizontalen Achse ist bereits die kalibrierte Energie aufgetragen.

energien oberhalb von 1 keV wurde Wasserstoff-artiges F^{8+} erzeugt. Der Lyman- α -Übergang (Ly- α) liegt bei diesem Ion bei etwa 827 eV und damit im betrachteten Energiebereich. Weiterhin befindet sich immer ein gewisser Anteil Sauerstoff als Restgas in der EBIT und bei den für die Erzeugung von F^{8+} nötigen Bedingungen entsteht auch Wasserstoff-artiges O^{7+} . Dieses besitzt mit Lyman- γ (Ly- γ) bei etwa 817 eV ebenfalls einen Übergang im betrachteten Energiebereich. In Abbildung 4.8 ist ein solches Spektrum gezeigt.

Die elektronische Struktur Wasserstoff-artiger Ionen, bestehend nur aus einem Kern mit einem gebundenen Elektron, kann mit hoher Genauigkeit berechnet werden [67]. Die Unsicherheiten solcher Rechnungen liegen weit unterhalb der Energieauflösung im durchgeführten Experiment. Deshalb konnten Lyman-Linien zur Kalibration herangezogen werden.

Aufspaltung der Lyman-Linien

Durch Spin-Bahn-Kopplung spalten die Kalibrationslinien auf [46] (siehe Abbildung 4.9). Die Aufspaltung der Ly- γ -Linien von Sauerstoff ist deutlich kleiner als die zu erwartende experimentelle Auflösung. Die beiden auftretenden Übergänge liegen laut NIST-Datenbank bei 816,95 eV und bei 816,97 eV [1]. Je nach heran-

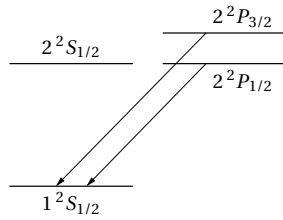


Abbildung 4.9. Durch Spin-Bahn-Kopplung spaltet die Lyman- α -Linie in zwei Linien auf. Diese entsprechen den gezeigten Übergängen vom 2P- ins 1S-Niveau.

gezogener Theorie liegen sie bei 816,95 eV und 817,00 eV [1]. Es wurde deshalb eine mittlere Resonanzenergie von 816,97 eV mit einem Fehler von $\pm 0,03$ eV angenommen. Die beiden Fluor-Ly- α -Linien liegen bei 827,24 eV für den Übergang aus dem $2p_{1/2}$ -Niveau, beziehungsweise 827,54 eV für den Übergang aus dem $2p_{3/2}$ -Niveau [67]. Die Aufspaltung beträgt etwa 0,3 eV und liegt damit in der Größenordnung der erreichbaren experimentellen Auflösung. Da die beiden Linien nicht getrennt werden konnten, war es notwendig, die jeweiligen Anteile der beiden Linien an der gemessenen Position genauer zu untersuchen.

Zu diesem Zweck wurde numerisch ein künstliches Spektrum mit beiden Linien in der beobachteten Auflösung von 0,8 eV generiert. An dieses Spektrum wurde ein χ^2 -Fit einer einzelnen Gauß-Kurve durchgeführt. Auf diese Weise wurden die Bedingungen der Aufwertung der experimentellen Daten nachgestellt. Es war hierfür jedoch notwendig, die relative Intensität der beiden Linien zu kennen.

Einfluß der Abstrahlcharakteristiken

Das relative Intensitätsverhältnis der beiden Ly- α -Linien ist allein durch die Drehimpulse der beteiligten Niveaus bestimmt und kann exakt angegeben werden [46]. Das Verhältnis der Übergangsraten aus dem Zustand $P_{3/2}$ und aus dem Zustand $P_{1/2}$ in den Grundzustand ist zwei. Jedoch wird das Licht von den Ionen nicht isotrop abgestrahlt. Wie in Abschnitt 2.6 beschrieben sorgt die Polarisierung der FEL-Photonen für eine von den am Übergang beteiligten Niveaus abhängende Abstrahlcharakteristik. Es war deshalb notwendig, die daraus resultierende Änderung der vom Germaniumdetektor wahrgenommenen Linienintensitäten zu ermitteln.

Die Ionenwolke in der EBIT besaß in axialer Richtung eine Ausdehnung von etwa 50 Millimetern. Der Abstand des Germaniumdetektors von der Ionenwolke betrug etwa 60 Millimeter. So erreichen den Detektor Photonen, die unter unterschiedlichen Winkeln bezüglich der Polarisierungsebene abgestrahlt wurden. Auf diese Weise tragen Ionen an unterschiedlichen Orten der Ionenwolke unterschiedlich stark zur gemessenen Linienintensität bei. Um dem Rechnung zu tragen wurden die im Experiment herrschenden Bedingungen numerisch simuliert.

Es wurden eine große Zahl Ionenorte und dazugehörige Detektionsorte erzeugt. Das ist in Abbildung 4.10 dargestellt. Basierend auf diesen Ortsparen wurden die Abstrahlwinkel bestimmt und der Mittelwert der sich ergebenden Beiträge an den

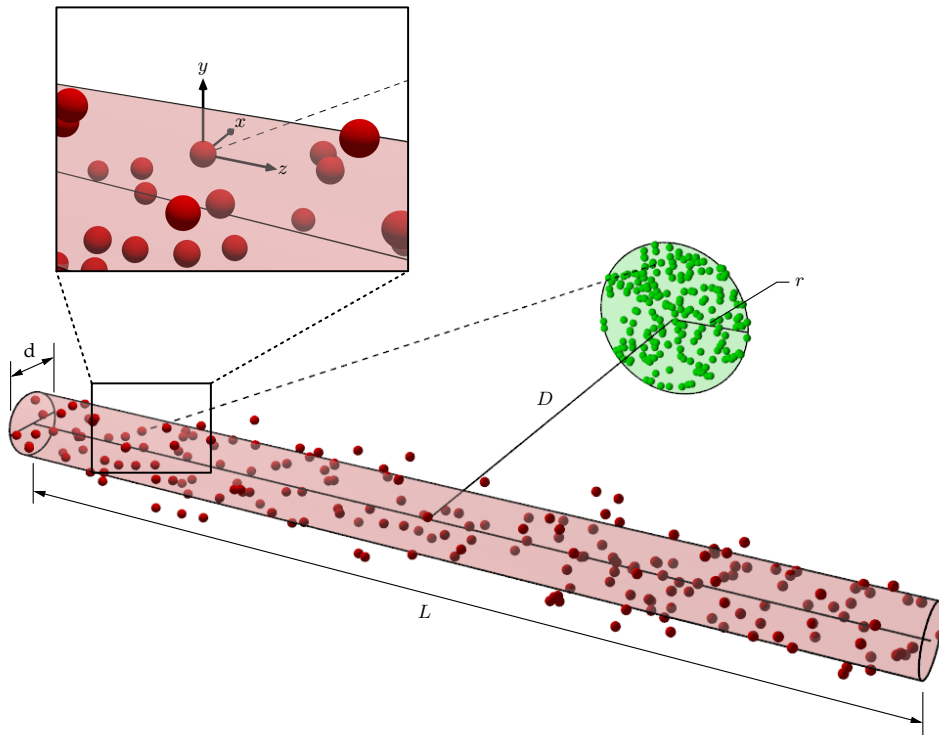


Abbildung 4.10. Um die von den Detektoren gemessenen Intensitäten vergleichen zu können, wurden zufällig verteilte Ionen (rot) und Detektionsorte (grün) erzeugt, die einer idealisierten Geometrie folgten. Diese wurde definiert durch die Länge L und den Durchmesser d der Ionenwolke, den Abstand D des Detektors von der Wolke und den Radius r des als Kreisfläche angenommenen Detektors. Der Ionenwolkendurchmesser d wurde als doppelte Standardabweichung einer Normalverteilung interpretiert. Weitere berücksichtigte aber nicht eingezeichnete Parameter sind in Tabelle 4.1 angegeben.

Linienintensitäten berechnet. Ionenorte und Detektionsorte wurden mit Hilfe eines numerischen Zufallsgenerators so verteilt, daß sie eine idealisierte Version der tatsächlichen Verteilung repräsentierten. Die Ionen wurden als gleichverteilt entlang der axialen Ausdehnung der Ionenwolke, sowie als normalverteilt in radialer Richtung angenommen. Die Detektionsorte wurden über die Detektorfläche gleichverteilt. Die in die Simulation eingegangenen geometrischen Parameter sind in Tabelle 4.1 aufgeführt.

Position von F-Ly- α und Abschätzung des Fehlers

Durch die Simulation und den weiter oben beschriebenen Fit konnte ein Wert für die wahrgenommene Resonanzenergie der Fluor-Ly- α -Linie gefunden werden. Um den dazugehörigen Fehler abzuschätzen, wurde die Simulation sehr oft wiederholt, wobei die in sie eingehenden Parameter mit Hilfe eines numerischen Zufallsgenerators normalverteilt variiert wurden. Die Variation spiegelte dabei geschätzte Fehler

Tabelle 4.1. Aufgeführt sind die bei der Simulation der Fallen- und Detektorgeometrie verwendeten Parameter samt angenommener Fehler.

Parameter	Beschreibung	Wert
L	Länge der Ionenwolke	50(10) mm
d	Durchmesser der Ionenwolke	400(100) μm
D	Abstand des Detektors von der Ionenwolke	60(15) mm
Δx	horizontale Verschiebung des Detektors	0(1) mm
Δy	vertikale Verschiebung des Detektors	0(1) mm
r	Radius der Detektorfläche	1.5(1) mm

der Parameter wieder. Als Resonanzenergie und dazugehöriger Fehler interpretiert wurden der Mittelwert und die Standardabweichung aller Einzelwerte. Es ergab sich als für die Energiekalibration verwendete Energie des Ly- α -Übergangs ein Wert von $(827,32 \pm 0,05)$ eV.

Kapitel 5

Ergebnisse

Dieses Kapitel widmet sich den Ergebnissen der durchgeführten Experimente. Im ersten Abschnitt wird ein Überblick über die mit den einzelnen Fluoreszenzdetektoren aufgenommenen Daten gegeben. Im zweiten Teil werden die gemessenen Resonanzenergien aufgeführt. Im dritten und letzten Teil dann wird das gefundene Verhältnis der Oszillatorstärken von 3C und 3D diskutiert. Es findet jeweils ein Vergleich mit bisherigen Messungen und einer Reihe verfügbarer theoretischer Werte statt, sowie eine Diskussion der Ergebnisse.

5.1 Überblick über die aufgenommenen Daten

Von den bei der ersten Messkampagne im Jahr 2011 aufgenommenen Daten wurden ausschließlich die vom zu der Zeit verwendeten Germaniumdetektor für die Datenauswertung herangezogen. Das Mikrokalorimeter und die damit aufgenommenen Spektren wurden wegen eines im Verlauf des Experiments aufgetretenen technischen Defekts nicht in die Auswertung miteinbezogen. Zwei typische mit dem Germaniumdetektor aufgenommene Spektren sind in Abbildung 5.1 gezeigt.

Wie in Abschnitt 3.4 beschrieben war der Detektor in der Polarisationssebene des FEL angebracht. Aus den in Abschnitt 2.6 aufgeführten Winkelverteilungen der Abstrahlung folgt gerade für die Linien 3C und 3D, die Hauptgegenstand der vorliegenden Arbeit sind, daß diese in Richtung des Detektors minimal ist. Tatsächlich findet genau in Detektorrichtung keinerlei Abstrahlung statt. Der Grund daß die Linien trotzdem beobachtet werden konnten, erschließt sich bei Betrachtung von Abbildung 4.10 im vorhergehenden Kapitel. Die Ionwolke stellt keine Punktquelle dar, sondern besitzt eine Ausdehnung, die vergleichbar ist mit dem Abstand des Detektors von den Ionen. Befinden sich Ionen jenseits des geometrischen Fallenzentrums, so werden sie vom Detektor unter Winkeln beobachtet, unter denen die Abstrahlcharakteristik ungleich null ist.

Bei der zweiten Kampagne 2012 wurde zur Maximierung der Photonenausbeute der MCP-Detektor, mit seiner im Vergleich zum Germaniumdetektor deutlich

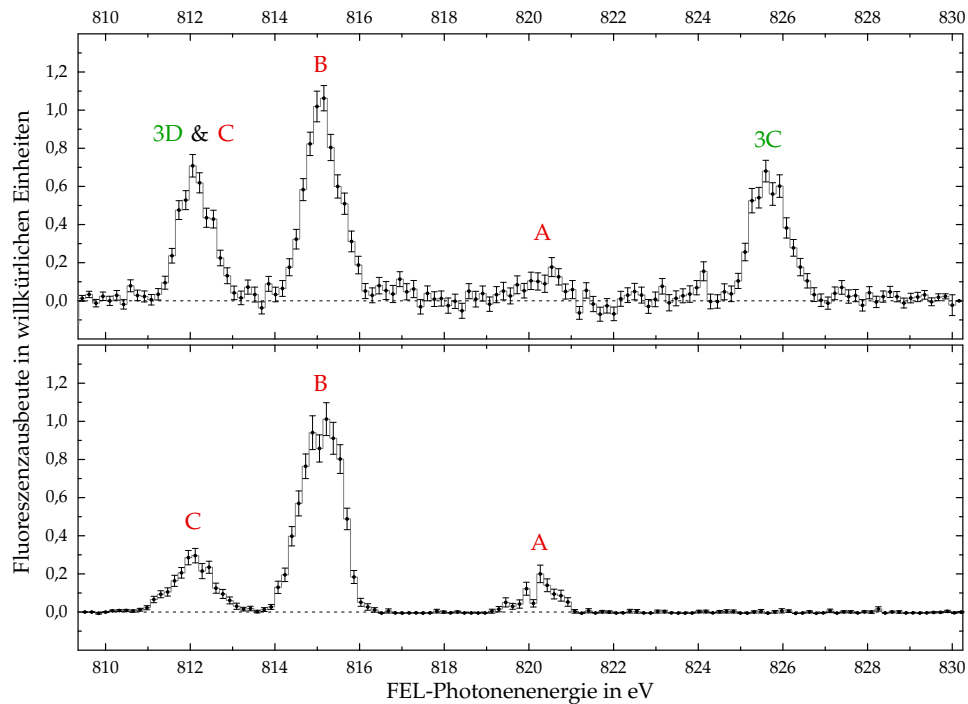


Abbildung 5.1. Zwei typische mit dem Germanium-Detektor aufgenommene Spektren. Im oberen Spektrum sind Resonanzen sowohl von Neon- (grün) wie auch von Natrium-artigem (rot) Eisen enthalten. Das untere Spektrum enthält nur Resonanzen von Natrium-artigem Eisen. Da das untere Spektrum im Bereich, in dem im oberen Spektrum die Linie 3C auftrat, keine Fluoreszenz zeigt, war sichergestellt, daß im unteren Spektrum kein Neon-artiges Eisen enthalten ist.

größeren Detektionsfläche, unter dem optimalen Detektionswinkel senkrecht zur Polarisationssebene angebracht. Ein typisches MCP-Spektrum ist in Abbildung 5.2 gezeigt. Außerdem wurde der ursprüngliche Germaniumdetektor um 45° zur Polarisationssebene gedreht und ein weiterer Germaniumdetektor wurde zusätzlich an der alten Position des ersten Germaniumdetektors montiert. Wegen technischer Probleme konnten mit dem zweiten Germaniumdetektor jedoch keine verwertbaren Daten aufgenommen werden.

In Abbildung 5.3 werden Rohspektren von Germaniumdetektor und MCP miteinander verglichen. Wegen der größeren Detektionsfläche registriert der MCP-Detektor generell mehr Fluoreszenzereignisse als der Germaniumdetektor. Auf der Linie 3C zum Beispiel lag die Zählrate des MCP um einen Faktor von etwa 5 höher. Gleichzeitig war das Signal-zu-Rausch-Verhältnis deutlich besser, da die bessere Zeitauflösung beim MCP eine noch bessere Untergrundunterdrückung ermöglichte.

Es konnten nach in der Zeit zwischen den Kampagnen durchgeführten Verbesserungen an der Datenaufnahme des Mikrokalorimeters auch erstmals Zeitkoin-

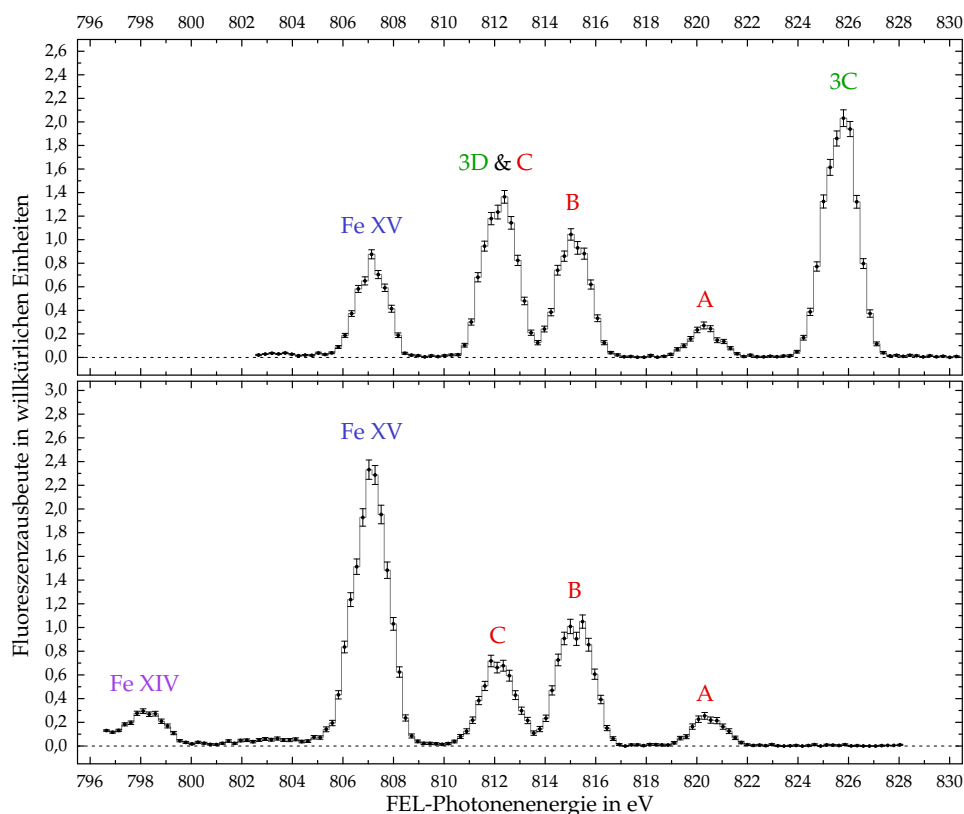


Abbildung 5.2. Zwei typische mit dem MCP-Detektor aufgenommene Spektren. Enthalten sind Resonanzen von Fe XVII (grün), Fe XVI rot und Fe XV (blau), sowie eine mutmaßlich zu Fe XIV gehörende Resonanz am linken Rand des unteren Spektrums (violett). Das obere Spektrum wurde aufgenommen bei einer Elektronenstrahlenergie von etwa 800 eV, das untere bei einer Energie von etwa 530 eV. So traten in letzterem die Linien von Fe XVII nicht auf. Da der MCP keine Photonen zählen konnte, sind die Linienintensitäten nicht miteinander vergleichbar.

zidenzen mit dem Mikrokolorimeter gemessen werden. Ein solches Spektrum ist im Abbildung 5.4 gezeigt. Für die Auswertung von Intensitätsverhältnissen und die Bestimmung von Resonanzenergien boten die Mikrokolorimeter-Spektren wegen der geringen Zählstatistik jedoch keinen Mehrwert und wurden nicht berücksichtigt. Die Mikrokolorimeterspektren boten einen Gesamtüberblick über die in der Falle vorhandenen Ladungszustände von Eisen, sowie über Verunreinigungen durch Sauerstoff und Kohlenstoff.

Die Photonenenergie des FEL wurde kontinuierlich über den jeweils betrachteten Bereich verfahren, während der Monochromator dieser Einstellung folgte. Es zeigte sich, daß das Verfahren der FEL-Energie am besten funktionierte, wenn es einer sinuidalen Funktion folgend erfolgte. Dieses regelmäßige Verfahren der FEL-Energie über einen vergleichsweise breiten Energiebereich war zuvor nie getestet worden. Es erforderte die Anpassung einer sehr großen Anzahl Betriebsparameter

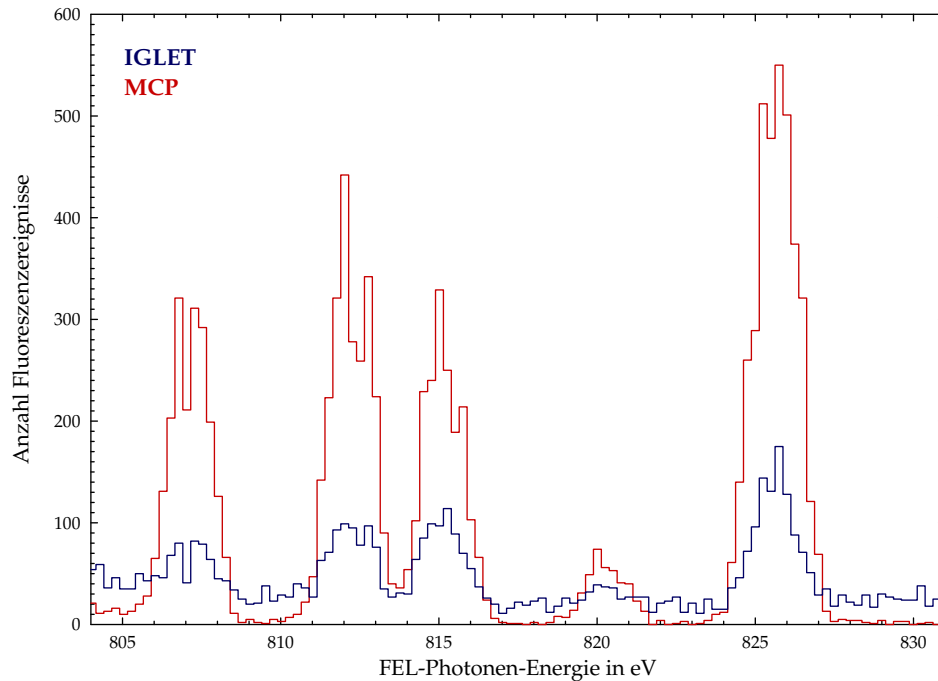


Abbildung 5.3. Gezeigt sind zwei zeitgleich mit dem Germanium- (blau) und dem MCP-Detektor (rot) aufgenommene Spektren. Aufgetragen ist die Anzahl Fluoreszenzereignisse innerhalb des Zeitkoinzidenzfensters über der FEL-Photonen-Energie. Die Aufnahme der Spektren erfolgte über einen Zeitraum von 4300 Sekunden. Es wurden keine weiteren Verarbeitungsschritte durchgeführt. Auch der trotz Zeitkoinzidenzmethode verbliebene Untergrund ist weiterhin enthalten. Es ist deutlich zu sehen, daß die MCP-Zählraten durchweg um ein Mehrfaches höher lagen, als die am Germaniumdetektor. Ebenfalls sichtbar ist, daß das MCP-Spektrum im Gegensatz zum Germaniumdetektorspektrum kaum Untergrund aufweist.

am gesamten Beschleuniger. Die den Beschleuniger betreuenden Wissenschaftler konnten dennoch innerhalb eines Tages eine passende Steuerungssequenz implementieren, die einen großen Gewinn an Photonenfluß bedeutete. Typische Periodendauern betrugen etwa 10 bis 30 Minuten.

Wie in den Abbildungen 4.3, 5.1 und 5.2 zu sehen, enthielten die Spektren zusammen mit den erwünschten Fe-XVII-Linien 3C und 3D auch noch weitere Linien. Diese wurden identifiziert als die als A und B bezeichneten Linien von Natrium-artigem Fe XVI. Wie in Abschnitt 3.6 beschrieben beträgt das Ionisationspotential von Natrium-artigem Eisen 489 eV, die vom Elektronenstrahl der EBIT mindestens aufgebracht werden müssen, um Neon-artiges Eisen zu erzeugen. Das Ionisationspotential von Magnesium-artigem Eisen ist mit 456 eV nahezu identisch. Bei den eingesetzten typischen Strahlenergien von etwa 800 eV wird zusammen mit Fe¹⁶⁺ immer auch Fe¹⁵⁺ erzeugt. In Abbildung 5.6 sind zur Verdeutlichung die Ergebnisse zweier Simulationen der Ladungszustandsverteilung in der EBIT unter

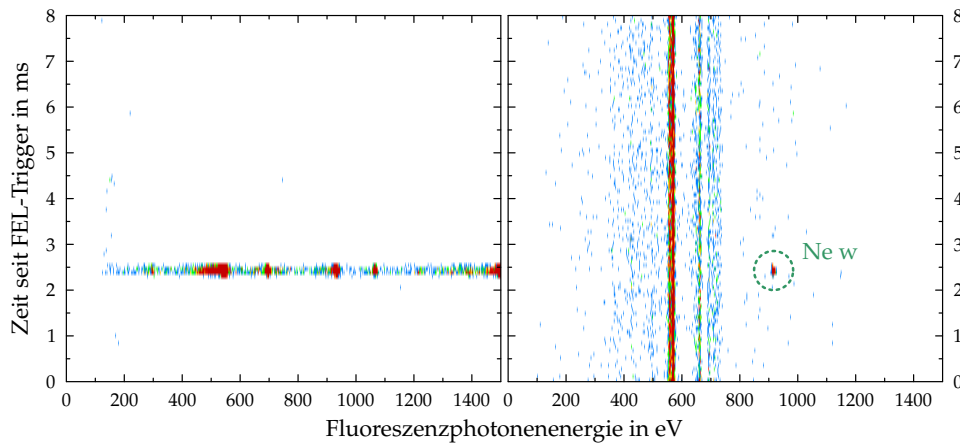


Abbildung 5.4. Zwei mit dem XRS-Mikrokalorimeter aufgenommene beispielhafte Spektren. Aufgetragen ist jeweils die farbkodierte Zählrate über der Fluoreszenzphotonenenergie und der Zeit seit dem FEL-Trigger. Der dargestellte Zeitraum entspricht einer kompletten FEL-Periode. Das linke Spektrum wurde ohne Elektronenstrahl aufgenommen als sich der YAG-Schirm in der Falle befand und vom Röntgen-Strahl getroffen wurde. Zu sehen ist, daß die durch die Bestrahlung des Festkörpers verursachte Fluoreszenz in Zeitkoinzidenz mit den FEL-Pulsen auftrat. Das rechte Spektrum wurde aufgenommen, als Neon in die EBIT injiziert wurde und die Energie der FEL-Photonen konstant bei etwa 920 eV lag. Der SXR-Monochromator wurde in nullter Ordnung betrieben, um den Photonenfluss zu maximieren. Die senkrechten Streifen im Spektrum stammen vom durch Elektronenstoßanregung hervorgerufenen Untergrund. Rechts davon ist das zeitkoinzidente Signal der Linie w von Helium-artigem Neon mit einem grünen gestrichelten Kreis markiert.

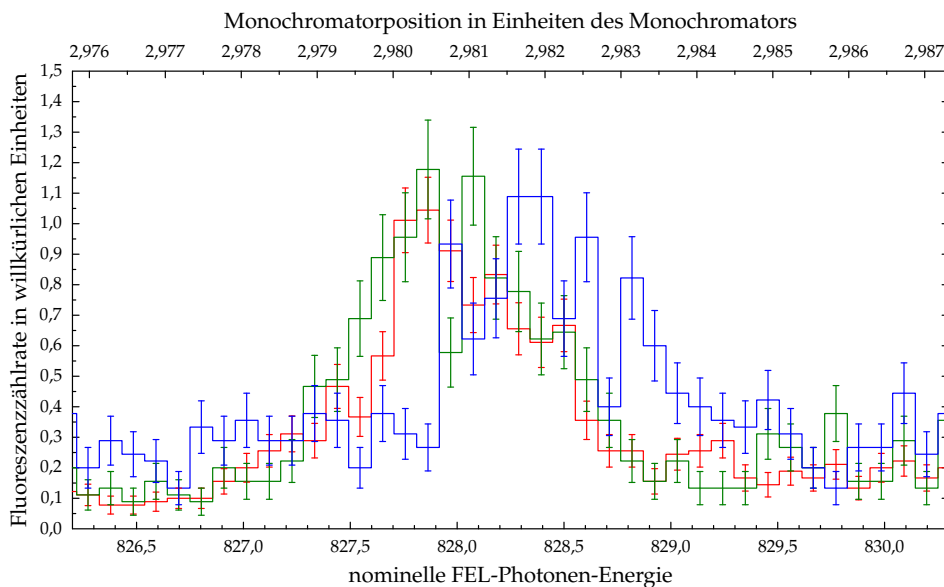


Abbildung 5.5. Ausschnitte aus drei direkt hintereinander bei gleichen Bedingungen aufgenommenen Rohspektren. Gezeigt ist die Fluor-Lyman- α -Linie als Funktion der nominellen Energie beziehungsweise der Monochromatorposition. Zu sehen ist die auftretende Verschiebung.

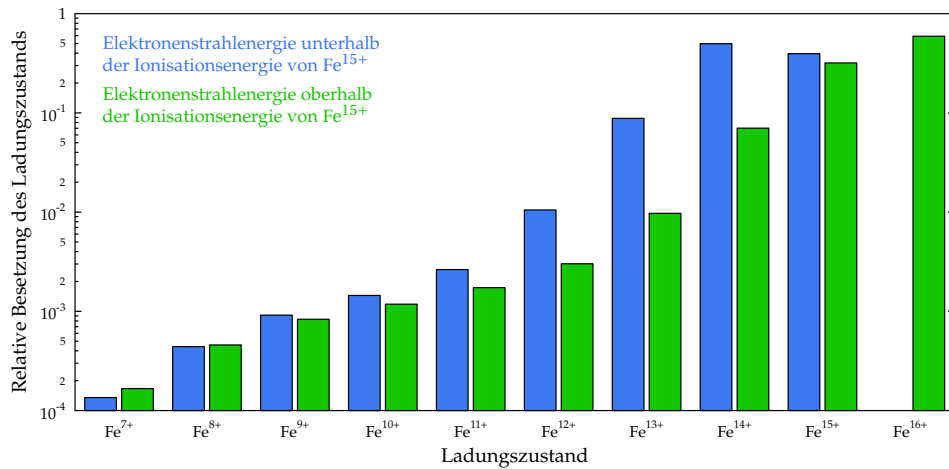


Abbildung 5.6. Die Ergebnisse zweier Simulationen der Ladungszustandsverteilung in der EBIT. Die Parameter der Simulation wurden so gewählt, daß sie dem durchgeführten Experiment nahe kommen. Aufgetragen ist jeweils die relative Besetzung der sieben- bis sechzehnfach positiv geladenen Ladungszustände von Eisen. Gezeigt sind Verteilungen für eine Elektronenstrahlenergie unterhalb (blau) und oberhalb (grün) der Schwelle zur Erzeugung von Fe¹⁶⁺. (Simulation von Crespo [29].)

dem Experiment nahe kommenden Bedingungen gezeigt. Es war deshalb klar, daß unter Umständen auch die hypothetische Linie C in den Spektren enthalten ist und die gemessene Intensität von 3D verfälscht. Aus diesem Grund wurde die Strahlenergie schrittweise gesenkt, bis in den Spektren die Linie 3C nicht mehr erkennbar war (siehe Abbildung 5.1 unten). Dies geschah bei einer Elektronenstrahlenergie von etwa 530 eV, abhängig von den genauen Fallenparametern. So konnten die Linien des Fe-XVI-Spektrums eindeutig vom Fe-XVII-Spektrum getrennt werden. In der Tat wurde die Linie C unter diesen Bedingungen beobachtet und steuert einen erheblichen Anteil zur Intensität von 3D bei.

Die Spektren der ersten Kampagne wurden mit der zum Zeitpunkt der Messungen bestmöglichen Auflösung von 0,8 eV aufgenommen. Während der zweiten Kampagne wurde der Ausgangsspaltz des SXR-Monochromators weniger weit geschlossen, wodurch die Auflösung nur noch 1 eV betrug (vergleiche auch die Abbildungen 5.1 und 5.2). Dies geschah, um die Signalausbeute zu verbessern. Die Resonanzen blieben dennoch einzeln aufgelöst.

Typische Elektronenstrahlströme lagen zwischen 30 und 200 mA. Die Driftröhrenpotentiale wurden so gewählt, daß das Potential an der zentralen Driftröhre leicht oberhalb der Potentiale an den angrenzenden Driftröhren lag. Wegen der unterschiedlichen Radien der Driftröhren liegt das vom Elektronenstrahl verursachte Raumladungspotential in der zentralen Driftröhre tiefer als in den angrenzenden. Darum blieben die Ionen weiterhin dreidimensional gefangen. Die resultierenden axiale Fallentiefen lagen bei wenigen Volt bis zu etwa 100 Volt. Betrachtet man die

daraus folgende Doppler-Verbreiterung

$$\delta E_{\gamma}^D = E_{\gamma} \cdot \sqrt{\frac{8 \ln 2 k T}{m c^2}} \quad (5.1)$$

der Linien [33] mit der Übergangsenergie E_{γ} , wobei m die Ionenmasse und T die Temperatur des Ionenensembles ist, dann stellt sich heraus, daß die temperaturbedingte Verbreiterung maximal 50 meV betragen haben kann. Die erreichte Auflösung von 0,8 eV rührt also zum Großteil vom Auflösungsvermögen des Monochromators her. Das wird auch bestätigt durch die Beobachtung, daß bei einer sehr tiefen Falle die Linien deutlich verbreitert waren, beim schrittweisen Anheben des Potentials an der zentralen Driftröhre ab einem gewissen Punkt die beobachtete Linienbreite aber nicht weiter abnahm, obwohl weiterhin Fluoreszenz nachgewiesen wurde.

In Abbildung 5.7 sind verschiedene Spektren zum Vergleich zusammen gezeigt. Enthalten sind zwei bei den beiden Kampagnen mit Germaniumdetektor laserspektroskopisch aufgenommene Spektren. Außerdem gezeigt sind zwei Spektren, die mit dem Mikrokalorimeter bei unterschiedlichen Elektronenstrahlenergien aufgenommen wurden. Diese Spektren entstanden nicht durch Verfahren der FEL-Photonenenergie, sondern klassisch spektroskopisch durch die Energieauflösung des Instruments. Zudem zu sehen ist ein mit einem Gitterspektrometer an Bord des Weltraumteleskops Chandra aufgenommenes Spektrum von Capella. Das bei einer Elektronenstrahlenergie von etwa 1700 eV aufgenommene Mikrokalorimeterspektrum zeigt, wie es gelingt, mit einer EBIT das astrophysikalische Spektrum zu reproduzieren. Das andere Mikrokalorimeterspektrum enthält weniger Ladungszustände von Eisen und verdeutlicht, daß es mit einer EBIT möglich ist, unterschiedliche Ionensorten gezielt spektroskopisch zu untersuchen. Die laserspektroskopisch gewonnenen Spektren besitzen eine Auflösung, die es erlaubt, einzelne Linien zu trennen, wo das mit dem Mikrokalorimeter nicht möglich ist. Die erreichte Auflösung ist vergleichbar mit der des Spektrums von Capella. Erst dadurch wird es möglich, astronomische Beobachtung und Laborexperiment miteinander zu vergleichen, ohne potentiell in den astronomischen Spektren enthaltene Informationen zu verlieren.

5.2 Messungen von Resonanzenergien

Basierend auf den bei der ersten Messkampagne gewonnenen Spektren wurden die Resonanzenergien der Linien 3C und 3D des Neon-artigen Eisens und die der Linien A, B und C des Natrium-artigen Eisens ermittelt. Bei der zweiten Kampagne wurde der Messbereich ausgeweitet und es konnten zusätzlich die Resonanzenergien jeweils einer Linie des Magnesium- beziehungsweise Aluminium-artigen Eisens gemessen werden.

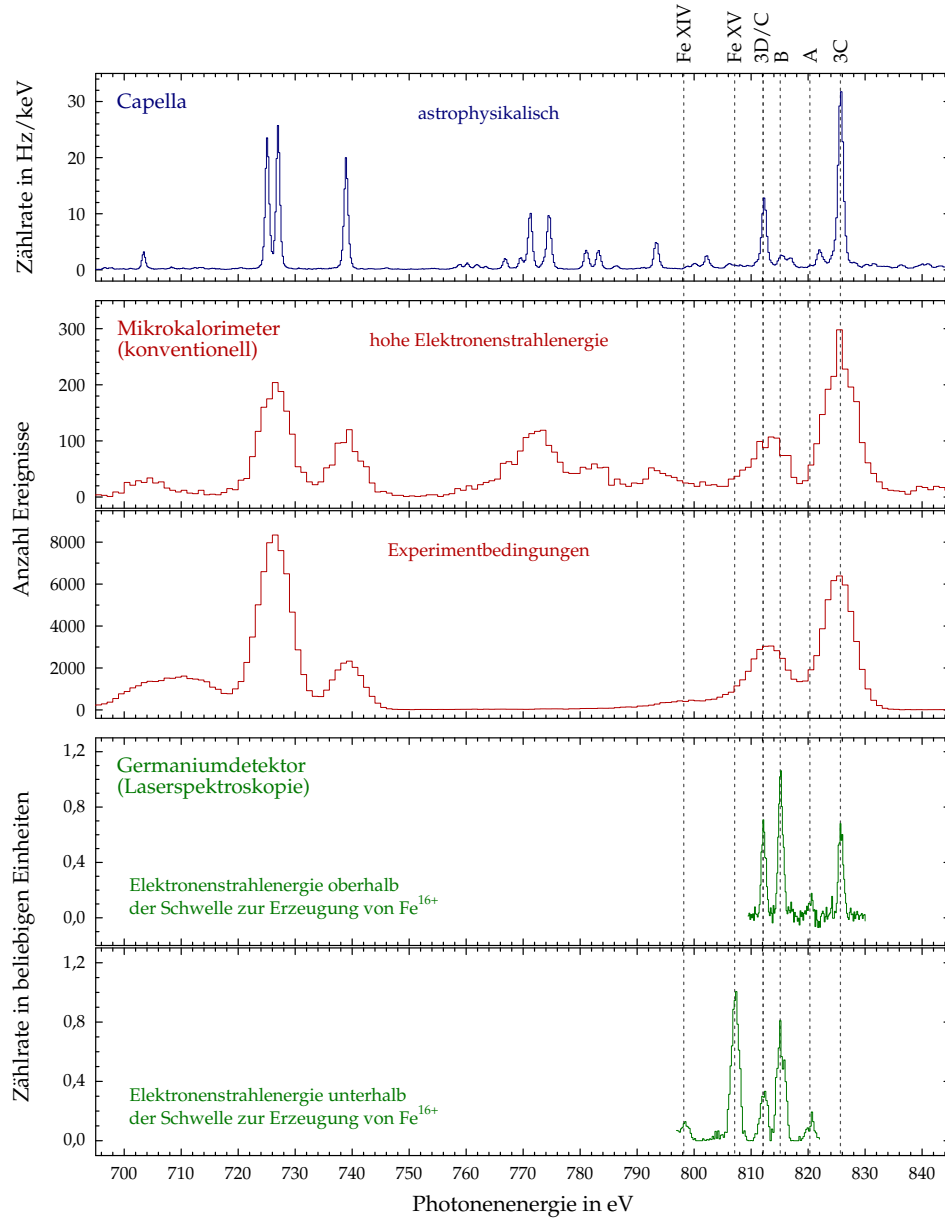


Abbildung 5.7. Das oberste Schaubild zeigt ein mit dem Weltraumteleskop Chandra aufgenommenes Spektrum von Capella. Die beiden darunterliegenden Spektren wurden im Rahmen dieser Arbeit mit dem Mikrokalorimeter aufgenommen. Die horizontale Achse zeigt hier die vom Mikrokalorimeter aufgelöste Photonenenergie. Das obere der beiden Spektren wurde bei einer Elektronenstrahlenergie von 1700 eV aufgenommen, das untere bei 800 eV. Die beiden untersten Spektren sind für diese Arbeit laserspektroskopisch aufgenommen. Die horizontale Achse ist hier die FEL-Photonenenergie. Das obere der beiden Spektren wurde bei der ersten Messkampagne bei einer Elektronenstrahlenergie von 800 eV aufgenommen, das untere bei der zweiten Messkampagne bei einer Strahlenergie von 530 eV. Als senkrechte gestrichelte Linien sind alle Resonanzen markiert, deren Resonanzenergien im Rahmen dieser Arbeit gemessen wurden. (Capella-Daten aus TGCat [64].)

Instabilitäten als systematischer Fehler

Zur Messung der Resonanzenergien von 3C, 3D, A, B und C wurden χ^2 -Fits mit Summen aus Gaußschen Glockenkurven an die mit dem Germanium-Detektor bei der ersten Kampagne gewonnenen Spektren durchgeführt. Wie in Abschnitt 4.3 im vorherigen Kapitel beschrieben, wurden weiterhin im selben Energiebereich Übergänge in Wasserstoff-artigen Ionen vermessen, und es wurde dadurch eine absolute Energiekalibration der Eisenspektren möglich.

Der Wechsel von Eisenpentacarbonyl zu Tetrafluorethan am Injektionssystem der EBIT nahm eine gewisse Zeit in Anspruch. Wegen des notwendigen Wechsels am Injektionssystem wurden auch keine Spektren mit Eisen und den Kalibrationslinien gleichzeitig aufgenommen. Es wurde deshalb darauf geachtet, die sonstigen Einstellungen an FEL und Monochromator möglichst konstant zu halten.

Es wurde außerdem untersucht, inwiefern die aufgezeichnete Stellung des Monochromators immer der selben Photonenenergie entsprach. In Abbildung 5.5 sind drei zu unterschiedlichen Zeitpunkten aufgenommene Spektren zu sehen. Es wird deutlich, daß die Position der Linien in den Einheiten des Monochromators schwankt. Es stellte sich heraus, daß diese Schwankungen zu jedem Zeitpunkt auftreten. Eine mögliche Erklärung hierfür sind mechanische oder thermische Instabilitäten des Monochromators. Es hat sich auch gezeigt, daß die Positionen der Linien zwar langsam schwanken, die Linienpositionen in den einzelnen Spektren relativ zueinander aber weitestgehend stabil bleiben. Aus diesem Grund wurden alle Linienpositionen zuerst nicht absolut bestimmt, sondern relativ zur Linie B. Diese Linie ist ausnahmslos in allen Eisenspektren enthalten und wegen ihrer vergleichsweise hohen Intensität besonders als Referenz geeignet. Auf diese Weise konnten auch Spektren berücksichtigt werden, die an anderen Tagen ohne direkte Kalibration aufgenommen wurden, wobei immer eine unkalkulierbare Verschiebung der Absolutenergien auftrat. Die relativen Energien waren davon innerhalb der Messgenauigkeit nicht betroffen.

Die absoluten Werte wurden erhalten, indem auf die Relativpositionen die absolute Position von B addiert wurde. Die Absolutposition von B wurde mit den Kalibrationslinien ermittelt. Dazu wurde ein Spektrum verwendet, daß zeitnah direkt vor dem Wechsel von Eisenpentacarbonyl zu Tetrafluorethan aufgenommen worden war. Alle Einstellungen an FEL und Monochromator wurden unverändert beibehalten, um weitere systematische Fehlerquellen zu vermeiden. Die gemessene Absolutposition von B beträgt 815,11 eV mit einem Fehler von 0,24 eV. Der rein statistische Anteil am Fehler beträgt 0,11 eV und der durch die Schwankungen hervorgerufene systematische Anteil beträgt 0,22 eV. Die Schwankungen dominieren den Fehler der Resonanzenergie von B.

Tabelle 5.1. Die Positionen aller vermessenen Resonanzen relativ zur Linie B. Positive Angaben entsprechen höheren Energien, negative niedrigeren. Der mit * gekennzeichnete Wert für 3D ist nicht gegen die Kontamination durch C korrigiert. Der für B angegebene Fehler ist gleich dem statistischen Fehler der mit den Kalibrationslinien festgelegten absoluten Resonanzenergie.

Ion	Linie	Resonanzenergie relativ zu B in eV
Fe XVII	3C	+10,560(18)
Fe XVII	3D	-2,960(8) *
		-2,885(72)
Fe XVI	A	+5,198(62)
Fe XVI	B	0,000(110)
Fe XVI	C	-3,040(38)
Fe XV	$3d_{3/2} - 2p_{1/2}$	-8,003(95)
Fe XIV	$3d_{3/2} - 2p_{1/2}$	-16,931(401)

Resonanzen von Fe XV und Fe XIV

Die Spektren der zweiten Kampagne decken einen größeren Energiebereich ab. In ihnen wurden zwei weitere Resonanzen identifiziert. Eine stammt vom Übergang $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ in Magnesium-artigem Eisen Fe^{14+} . Die andere stammt mutmaßlich vom gleichen Übergang in Aluminium-artigem Eisen Fe^{13+} . Bei der zweiten Kampagne wurden keine Kalibrationslinien aufgenommen. Stattdessen wurden die Linien A, B, C und 3C verwendet, um die Spektren gegen die in der ersten Kampagne gemessenen Linienpositionen zu kalibrieren. Es stellte sich heraus, daß die per Gauß-Fit ermittelten Positionen beim Germaniumdetektor und beim MCP innerhalb der Fehler übereinstimmen. Wegen der weitaus höheren Anzahl gemessener Ereignisse ist der Fehler der mittels MCP-Detektor gemessenen Linienpositionen kleiner und die Werte, die vom Germaniumdetektor stammen, tragen kaum zum finalen Wert bei. Weiterhin ist der Fehler deutlich dominiert durch die Fehler der in der ersten Kampagne vermessenen Linien. Aus diesem Grund wurden für die Positionsbestimmung der beiden Linien nur MCP-Spektren eingesetzt.

Alle gemessenen relativen Linienpositionen sind in Tabelle 5.1 aufgeführt. In Tabelle 5.2 und Abbildung 5.8 sind die endgültigen absoluten Resonanzenergien aufgelistet.

Abschätzung des Einflusses von C auf die Position von 3D

Die Linie 3D konnte nie ohne Kontamination durch die Linie C aufgenommen werden. Es konnte jedoch Linie C vollständig unverfälscht vermessen werden. Die gemessenen relativen Positionen der gemischten Linie 3D&C und der reinen Linie

Table 5.2. Die Absolutpositionen aller vermessenen Resonanzen. Unter den im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Werte ist eine Auswahl bisheriger experimenteller Werte aufgeföhrt. Um unteren Teil der Tabelle sind eine Reihe theoretisch vorhergesagter Resonanzenergien angegeben. Mit * gekennzeichnete Werte für 3D beinhalten potentiell einen Beitrag der Linie C.

Quelle	Methode	Resonanzenergie in eV							
		Fe XVII		Fe XVI			Fe XV	Fe XIV	
		3C	3D	A	B	C	$3d_{3/2} - 2p_{1/2}$	$3d_{3/2} - 2p_{1/2}$	
diese Arbeit	EBIT, FEL	825,67(24)	812,15(24)* 812,22(25)	820,31(25)	815,11(24)	812,07(25)	807,11(26)	798,18(47)	
Hutcheon (1976) [65]	Sonne	825,85(11)	812,37(11)*						
Brown (1998) [19]	EBIT	825,79(6)	812,43(10)*						
Brown (2001) [20]	EBIT			820,27(33)	815,26(21)	812,48(1.07)			
Graf (2009) [49]	EBIT			820,49(22)	815,15(21)	812,43(16)			
Beilmann (2012) [10]	EBIT, Synchr.			820,21(6)	814,97(7)	812,02(6)			
Simon (2010) [107]	EBIT, Synchr.						807,1(2)		
Brown (1998) [19]	HULLAC	825,79	811,84						
Gu (2006) [52]	RMBPT			820,40	815,22	812,20	807,25	797,04	
Graf (2009) [49]	FAC			820,71	814,88	811,63			
Oreshkina (2012) [57]	CIDFS	824,5	811,1	821,5	814,9	812,0			
Harman (2012) [57]	MCDF	825,1	812,4	819,4	814,6	811,5			
Simon (2010) [107]	MCDF						807,74		

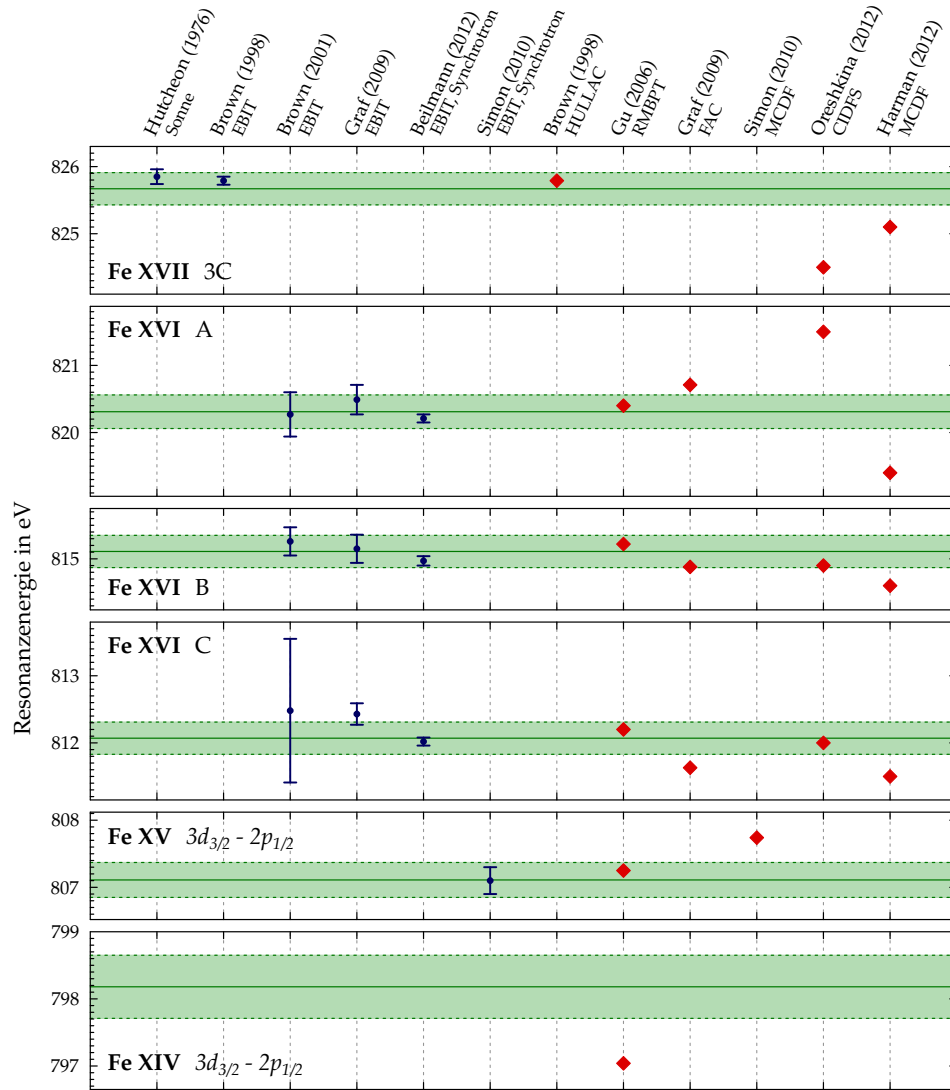


Abbildung 5.8. Gezeigt ist eine grafische Repräsentation der Werte aus Tabelle 5.2 mit Ausnahme der Linie 3D. Die grünen Bänder kennzeichnen die gemessenen Werte inklusive Fehler. Die blauen Punkte mit Fehlerbalken entsprechen experimentellen Werten und die roten rauten stellen die aufgeführten Theoriewerte dar. Der Maßstab der vertikalen Resonanzenergieachse ist in den sechs Teilgrafiken identisch, um die Vergleichbarkeit der Werte zu gewährleisten.

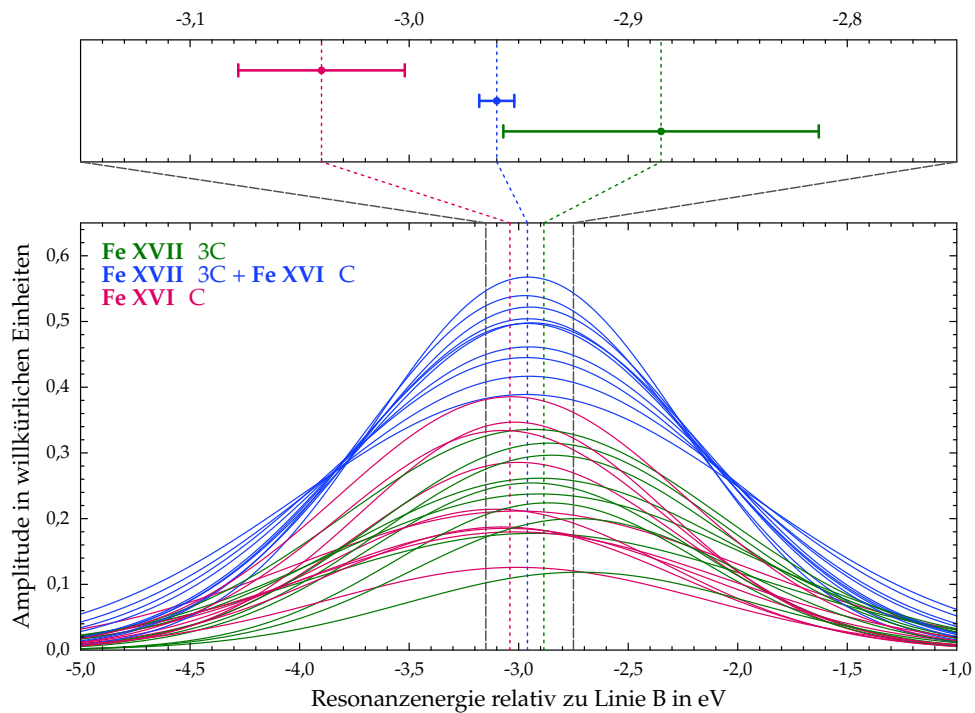


Abbildung 5.9. Um die Lage der Linie 3D zu ermitteln, die in den gemessenen Spektren nur überlagert von der Linie C auftrat, wurden künstliche Spektren generiert, bei denen eine simulierte Linie C (violett) und eine simulierte Linie 3D (grün) erzeugt wurden. Die simulierte Linie 3D wurde so verschoben, daß die Summe beider Linien (blau) der Messung entsprach. Die Simulation wurde mit gemäß ihrer jeweiligen Fehler zufällig variierten Ausgangspositionen und Linienintensitäten durchgeführt. Im unteren Teil der Abbildung sind einige beispielhafte so generierte Resonanzen zu sehen. Im oberen Teil sind die Linienpositionen mit ihren Fehlern gezeigt. Die senkrechten gestrichelten Linien markieren die Positionen sowohl im oberen als auch im unteren Teil.

C sind innerhalb ihrer Fehlerbalken nicht identisch. Die Resonanzenergie von C liegt 155 meV unterhalb derer von 3D&C.

Um die tatsächliche Lage von 3D abzuschätzen wurde ein Ansatz ähnlich dem in Abschnitt 4.3 beschriebenen verwendet. Es wurden eine Reihe künstlicher Spektren mit den gemessenen Positionen von C und 3D&C erzeugt. Dazu wurde jeweils eine künstliche Linie 3D erzeugt und ihre Resonanzenergie so verschoben, daß die sich als Summe ergebende Linie 3D&C ihren Schwerpunkt bei der gemessenen Position hat. Um einen Fehler für die gefundene Position abzuschätzen wurde das Verfahren mit normalverteilt zufällig variierenden Eingabeparametern wiederholt. Eingabeparameter waren dabei die Positionen von C und 3D&C, sowie deren relative Intensitäten. Die Variationsbreiten dieser Werte waren die dazugehörigen Fehler. Mittelwert und Standardabweichung der angepassten Positionen von 3D wurden interpretiert als Resonanzenergie und Fehler. Das Verfahren, die Eingabeparameter und das Endergebnis sind in Abbildung 5.9 dargestellt.

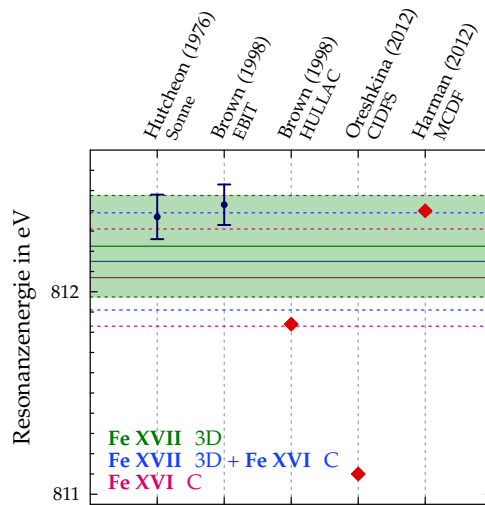


Abbildung 5.10. Gezeigt ist die ermittelte absolute Position der Linie 3D. Diese ist als grünes Band angegeben. Um die Verschiebung durch die Anwesenheit von C am Ort von 3D zu illustrieren sind außerdem die Resonanzenergie von C (violett) und die scheinbare Resonanzenergie von 3D (blau) eingezeichnet. Die blauen Punkte mit Fehlerbalken und die roten Rauten entsprechen den gemessenen und gerechneten Vergleichswerten aus Tabelle 5.2. Die Resonanzenergieachse ist relativ zu derjenigen in Abbildung 5.8 gestreckt.

Für dieses Verfahren wurden die Linienpositionen relativ zu B verwendet, um den in der Absolutposition von B enthaltenen systematischen Fehler nicht mehrfach in das Resultat einfließen zu lassen. Die absolute Position ergab sich dann durch Addition der Absolutposition von B. In Abbildung 5.10 ist die ermittelte Lage von 3D zusammen mit der Verschiebung in der absoluten Resonanzenergie illustriert. Es ergibt sich ein Wert von $(812,22 \pm 0,25)$ eV.

Vergleich mit bisherigen Messungen und Rechnungen

In Tabelle 5.2 und den Abbildungen 5.8 und 5.10 werden die gefundenen Resonanzenergien mit einer Auswahl bisheriger Messungen und einer Reihe verfügbarer Theoriewerte verglichen.

Die bisherigen experimentellen Werte stimmen allesamt innerhalb der Fehlerbalken mit denen der hier diskutierten Messungen überein. Die aus Beobachtungen der Sonne [65] und aus konventionellen EBIT-Messungen [19] stammenden Lagen der Resonanzen 3C und 3D weichen beide geringfügig innerhalb der jeweiligen Fehler zu höheren Energien hin ab. Das selbe gilt für die Positionen der Linien B und C gemessen an einer EBIT mit konventionellen Spektrometern [20, 49]. Bei Linie A weicht eine EBIT-Messung zu höheren Energien [49] und eine zu niedrigeren Energien [20] hin ab, wobei letztere Messung sehr nahe am in dieser Arbeit ermittelten Wert liegt. Die mit der FLASH-EBIT am Synchrotron BESSY II durchgeführten Photoionisationsexperimente [10, 107] stellen eine komplett andere Herangehensweise dar. Dabei wurde nicht die Fluoreszenz der Ionen betrachtet, sondern sie wurden aus der Falle extrahiert und nach ihrem Ladungszustand getrennt. Durch eine photonenergieabhängige Messung der Ionenausbeute in benachbarten Ladungszuständen wurde resonante Photoionisation nachgewiesen. Diese erfolgt wie in Abschnitt 2.1, Unterabschnitt „Ionisationsprozesse“ beschrieben durch Au-

toionisation nach resonanter Photoabsorption. Der Anregungsprozess ist identisch zu dem bei LCLS betrachteten und nur der Abregungskanal ist ein anderer. Die Messung von Simon [107] der Fe-XV-Linie stimmt nahezu perfekt mit dem für diese Arbeit gemessenen Wert überein. Alle Messungen der Resonanzen A, B und C von Beilmann [10] weichen um etwa 0,1 eV zu niedrigeren Energien hin ab, was aber innerhalb der Messunsicherheiten liegt.

Es ist wahrscheinlich, daß wegen der Dominanz des systematischen Fehlers in den durchgeführten Messungen alle Resonanzenergien eine konstante Verschiebung von den wahren Werten aufweisen. Diese Vermutung ist mit den anderen Experimenten gut verträglich. Sonnenbeobachtungen und konventionelle EBIT-Messungen weichen tendenziell zu höheren Energien hin ab. Nur die per Photoionisation gemessenen Resonanzenergien der Fe-XVI-Linien liegen alle zu niedrigeren Energien hin verschoben. Es ist anzunehmen, daß auch die anderen Messungen jeweils einen systematischen Fehler aufweisen. Die Fehler der im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Resonanzenergien sind trotz des hohen systematischen Anteils vergleichbar mit den Ergebnissen konventioneller Spektroskopie. Die erreichbare Genauigkeit war hauptsächlich begrenzt durch das Auflösungsvermögen und die Stabilität des SXR-Monochromators. Die Messungen bei BESSY II zeigen eine etwa um einen Faktor 3 höhere Genauigkeit, die vor allem zurückzuführen ist auf die weitaus höhere Auflösung und bessere Stabilität des dortigen Monochromators.

Die aufgeführten theoretischen Resonanzenergien weichen teilweise deutlich von den gemessenen Werten ab. Die Werte streuen um die experimentellen Werte herum. Auffällig ist, daß die theoretischen Positionen von B deutlich weniger streuen, als die von A und C. Das kann in den Energieniveaus des Übergangs B begründet liegen. Eine andere mögliche Erklärung ist, daß wegen ihrer höheren Intensität und guten Auflösbarkeit präzisere Messungen der Linie B vorlagen, worauf hin die verfügbaren theoretischen Ansätze dahingehend optimiert wurden, diese Resonanzenergie möglichst gut zu reproduzieren.

Weiterhin weichen die unterschiedlichen theoretischen Ansätze vornehmlich entweder zu positiven oder zu negativen Energien hin von den Messungen ab. Es scheint, als würden auch die Theorien einer systematischen Verschiebung unterliegen. Die Lage der Resonanzen relativ zueinander kann anscheinend besser vorhergesagt werden, als deren absolute Positionen.

Eine besonders gute Übereinstimmung, insbesondere unter Inkaufnahme einer konstanten Verschiebung, zeigt der Ansatz der RMBPT (engl. Relativistic Many Body Perturbation Theory) [52]. Nur die Lage der Fe-XIV-Resonanz wird innerhalb der Fehlerbalken nicht reproduziert. Es besteht die Möglichkeit, daß der Übergang nicht korrekt identifiziert wurde. Jedoch gehört der angegebene Theoriewert zu der Resonanz eines Ladungszustandes von Eisen, die laut RMBPT am nächsten an der gefundenen Resonanz liegt. In den einschlägigen Datenbanken [34, 76] ist für die gemessene Resonanzenergie keine passende Line verzeichnet und publi-

zierte spektroskopische Messungen ausreichender Genauigkeit an vergleichbaren Plasmen konnten nicht gefunden werden.

Die anderen Ansätze, wie Multi-Configuration-Dirac-Fock (MCDF) [57] oder Configuration-Interaction-Dirac-Fock-Sturmian (CIDFS) [57] liefern teilweise um mehr als 1 eV abweichende Resonanzenergien. Mit Hilfe des Flexible Atomic Code (FAC) [53] berechnete Werte weichen weniger deutlich ab. Es ist jedoch festzustellen, daß der Code eine Reihe durch den Nutzer zu wählender freier Parameter besitzt. Die gerechneten Werte können mit Hilfe dieser Parameter in einem gewissen Rahmen an die gemessenen Werte angepasst werden. So findet Graf für Resonanz A eine Energie von 820,71 eV [49] und Beilmann eine Energie von 821,08 eV [10]. Ähnliche Verschiebungen von etwa 0,4 eV in der Absolutenergie finden sich auch für die Resonanzen B und C.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß Röntgen-Laserspektroskopie in der durchgeführten Form für die Messung von Resonanzenergien verwendet werden kann und bereits eine ähnliche Genauigkeit erreicht hat, wie hochauflösende konventionelle Spektroskopie. Im Gegensatz zu dieser besitzt die Laserspektroskopie jedoch das Potential zu deutlichen Auflösungssteigerungen. Der Vergleich mit verfügbaren Rechnungen zeigt, daß die Genauigkeit dieser in der Größenordnung von 1 eV liegt und damit etwa eine Größenordnung schlechter ist als die experimentell mögliche.

5.3 Das Intensitätsverhältnis von 3C und 3D

Um das Verhältnis der Intensitäten von 3C und 3D zu bestimmen war es notwendig die gleichzeitige Anwesenheit von C am Ort von 3D zu berücksichtigen. Ist die scheinbare Intensität der Linie 3D inklusive C in einem Spektrum gegeben als Summe der einzelnen Intensitäten von 3D und C

$$I_{3D\&C} = I_{3D} + I_C , \quad (5.2)$$

dann muß I_C ermittelt werden. Zu diesem Zweck wurde die Tatsache ausgenutzt, daß Linie B zum selben Ladungszustand gehört wie C, intensiv ist und gut von den umgebenden Linien getrennt werden konnte. Wie bereits diskutiert wurde die Elektronenstrahlenergie abgesenkt, um Spektren aufzunehmen, die die Linien 3C und 3D nicht enthielten (siehe Seite 90). Es konnten in solchen Spektren die Intensitäten I'_C und I'_B gemessen werden. Jetzt war es möglich die relative Intensität von C im Verhältnis zu B zu ermitteln und von der relativen Intensität von 3D&C im Verhältnis zu B zu subtrahieren, um die Intensität von 3D relativ zu B zu erhalten.

$$\frac{I_{3D\&C}}{I_B} - \frac{I'_C}{I'_B} = \frac{I_{3D}}{I_B} \quad (5.3)$$

Das gesuchte Intensitätsverhältnis von 3C und 3D kann dann berechnet werden als

$$\frac{I_{3C}}{I_{3D}} = \frac{I_{3C}}{I_B} \cdot \frac{I_B}{I_{3D}} . \quad (5.4)$$

Zur Bestimmung der Intensitäten aus den Spektren wurden zwei Ansätze untersucht. Bei der ersten Variante wurden an die fertigen Spektren Gauß-Kurven angepasst. Die Fläche unter einer Kurve wurde dann als Intensität der Linie interpretiert. Bei der zweiten Variante wurden keine Fits benötigt. Es wurden schon in den bei der Datenauswertung verwendeten Intensitätsklassen die Zählraten über die Resonanzen aufsummiert und die benötigten Verhältnisse in jeder Intensitätsklasse einzeln ermittelt. Das zu einem Spektrum gehörige Verhältnis war dann der gewichtete Mittelwert der Verhältnisse aus allen Intensitätsklassen. Ein Beispiel für ein so gewonnenes Verhältnis ist in Abbildung 4.6 zu sehen. Beide Verfahren lieferten innerhalb der Fehler identische Ergebnisse. Das erste Verfahren erzeugt um etwa 10% bis 20% kleinere Absolutfehler, da über den Fit das Wissen über die zu erwartende Form der Resonanz mit eingeht. Das zweite Verfahren war auf die Spektren der zweiten Kampagne nicht anwendbar, da wegen der schlechteren Energieauflösung die Resonanz B einen kleinen Überlapp mit den Resonanzen 3D und C aufwies. Aus beiden Gründen wurden die folgenden Ergebnisse mit Hilfe des sich auf Fits stützenden Verfahrens gewonnen.

Bei der üblicherweise zu Einsatz kommenden Gaußschen Fehlerfortpflanzung [31, 77] wird die resultierende Wahrscheinlichkeitsdichte einer auf eine oder mehrere Zufallsvariablen angewandten Funktion um einen Mittelwert entwickelt, um die resultierende Standardabweichung zu erhalten. Dieses Verfahren ist nicht exakt. Selbst wenn nur normalverteilte Variablen eingehen, dann ist die resultierende Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht zwangsläufig normalverteilt. Streng gilt die Fehlerfortpflanzung nur, wenn die Variablen in erster oder zweiter Potenz eingehen [77]. Bei der Berechnung des Verhältnisses von 3C und 3D werden eine Reihe Divisionen durchgeführt. Die Werte, die durch einander geteilt werden, sind dabei mit Fehlern in der Größenordnung von 10% behaftet. Die resultierenden Wahrscheinlichkeitsdichten der Erwartungswerte der Quotienten sind nicht normalverteilt. Aus diesem Grund wurde ein robusterer Ansatz zur Berechnung von Mittelwerten und Standardabweichungen verwendet.

Ist die zur Größe x gehörende Wahrscheinlichkeitsdichte $g_x(x)$, dann ist der Mittelwert definiert als [77]

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x g_x(x) dx . \quad (5.5)$$

Die Standardabweichung zu diesem Mittelwert ist [77]

$$\sigma_x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} (x - \langle x \rangle)^2 g_x(x) dx \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (5.6)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $g_x(x)$ folgt aus den Wahrscheinlichkeitsdichten aller Variablen, die in die Berechnung von x eingehen. Ist $x = f(a_1, \dots, a_n)$ eine Funktion der Parameter a_1 bis a_n mit den Wahrscheinlichkeitsdichten $g_{a_1}(a_1)$ bis $g_{a_n}(a_n)$, und ist D_x der Bereich des durch die Parameter aufgespannten Raums, in dem $x = f(a_1, \dots, a_n)$ für ein gegebenes x erfüllt ist, dann ist

$$g_x(x) = \int_{D_x} \cdots \int da_1 \cdots da_n \prod_{i=1}^n g_{a_i}(a_i) . \quad (5.7)$$

Im Fall der Division zweier Zahlen a_1 und a_2 zum Beispiel ist

$$x = f(a_1, a_2) = \frac{a_1}{a_2} \quad (5.8)$$

und es folgt

$$g_x(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx g_{a_1}(a_1) g_{a_2}(a_1/x) . \quad (5.9)$$

Die Integrale aus den Gleichungen 5.5 bis 5.7 lassen sich effektiv mit dem numerischen Verfahren der Monte-Carlo-Integration [77, 95] bis zur gewünschten Genauigkeit berechnen. Für die Datenauswertung wurde dieses Verfahren angewandt, wobei die berechneten Verhältnisse als Funktionen der gemessenen Verhältnisse ausgedrückt wurden. So wurden alle Mittelwerte und Standardabweichungen berechnet.

Bei der ersten Kampagne 2011 wurden sechs Spektren mit Fe XVII und Fe XVI aufgenommen. Dazu kam ein Spektrum nur mit Fe XVI. Aus letzterem wurde das Verhältnis I'_C/I'_B gewonnen und zum Abzug von C aus den gemischten Spektren verwendet. Jedes Spektrum lieferte einen Wert für das gesuchte Verhältnis. Aus diesen Werten folgte ein Mittelwert von $2,65 \pm 0,27$. Bei der Berechnung dieses Mittelwerts wurde erneut auf die Betrachtung von Wahrscheinlichkeitsdichten zurückgegriffen. Beim üblichen gewichteten Mittelwert werden die Absolutfehler zur Gewichtung herangezogen, was im Fall von Quotienten in der Größenordnung von eins und mit relativen Fehlern von mehr als 10% zu einer Bevorzugung kleiner Werte gegenüber großen Werten führt, selbst wenn diese ähnliche relative Fehler aufweisen. Da hier überprüft werden sollte, ob das gemessene 3C/3D-Verhältnis kleiner ist als das vorhergesagte Oszillatorenstärkenverhältnis, galt es eine systematische Verschiebung hin zu kleineren Werten zu vermeiden. Der Mittelwert wurde deshalb aus der Wahrscheinlichkeitsdichte von $x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i$ nach Gleichung 5.5 berechnet, wobei a_1 bis a_n die fehlerbehafteten Werte der Einzelspektren waren. Die Standardabweichung folgte aus Gleichung 5.6.

Bei der zweiten Kampagne ein Jahr später wurde jeweils nur ein Spektrum jeden Typs aufgenommen. Durch die Montage des Detektors unter einem besser geeigneten Winkel war die Intensität der Linien 3C und 3D im Verhältnis zu den Linien B

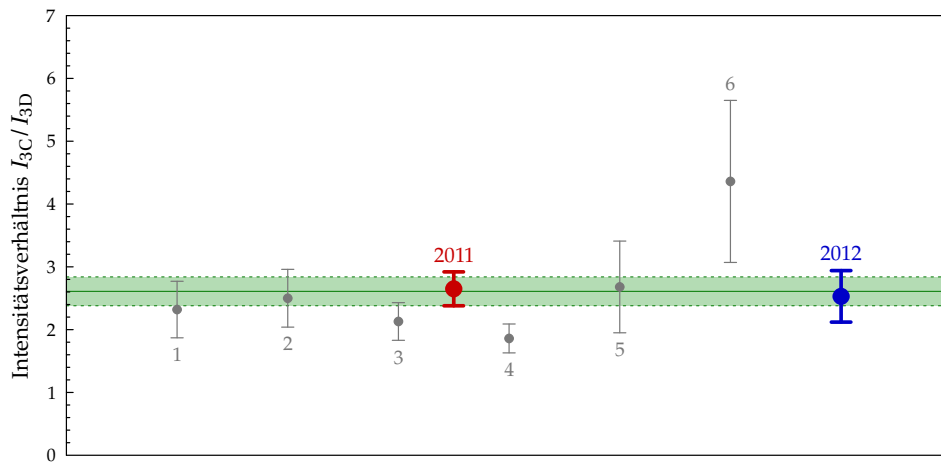


Abbildung 5.11. Gezeigt sind die Ergebnisse der sechs Einzelmessungen des Intensitätsverhältnisses 3C/3D der Kampagne 2011 (grau) und der daraus gewonnene Mittelwert (rot). Außerdem enthalten ist das Ergebnis der Kampagne 2012 (blau). Das grüne Band markiert den gewichteten Mittelwert beider Kampagnen inklusive Unsicherheit.

und C deutlich höher. Der aus den Daten der zweiten Kampagne gewonnene Wert betrug $2,53 \pm 0,41$. Der gewichtete Mittelwert aus den beiden Resultaten beträgt $2,61 \pm 0,23$. Die gemessenen und die abgeleiteten Verhältnisse aus allen Spektren sind in Tabelle 5.3 aufgeführt. In Abbildung 5.11 sind alle Werte für das Verhältnis der Intensitäten von 3C und 3D zusammen mit den Mittelwerten gezeigt.

Abschätzung der dominanten Fehlerbeiträge

Es gehen insgesamt fünf Linienintensitäten in die Gleichungen 5.3 und 5.4 ein. Jede einzelne davon ist mit einem eigenen Fehler behaftet. Um abzuschätzen, welchen Einfluß die Notwendigkeit C von 3D zu subtrahieren auf den resultierenden Fehler des 3C/3D-Verhältnisses hat, wurde die Gaußsche Fehlerfortpflanzung [77] verwendet. Es wurde die Propagation der relativen Fehler durch die Gleichungen betrachtet. Der Anteil des Gesamtfehlers, der von I'_B , I'_C und I_B stammte, wurde dem Abzug von C zugeschrieben. Da, wie oben beschrieben, die Gaußsche Fehlerfortpflanzung bei den auftretenden Divisionen zu Ungenauigkeiten führt, dienen die Ergebnisse dieser Rechnungen vornehmlich der Auffindung von Tendenzen.

Eine weitere Fehlerquelle war die Unterteilung in Intensitätsklassen. Es war nicht direkt möglich, diesen Fehlerbeitrag zu ermitteln. Er konnte aber abgeschätzt werden. Dazu wurden Spektren ohne Unterteilung in Intensitätsklassen erzeugt und das resultierende Verhältnis von 3C und 3D inklusive Fehlerangabe berechnet. Solcherart gewonnene Verhältnisse weisen einen kleineren relativen Fehler auf, als die mit Unterteilung ermittelten. Der Unterschied im Fehler wurde der Verwendung von Intensitätsklassen zugeschrieben.

Tabelle 5.3. Die gemessenen und die abgeleiteten Verhältnisse aus allen berücksichtigten Spektren beider Messkampagnen.

Kampagne	Spektrum	Verhältnis	Wert
2011	Fe XVI	I'_C / I'_B	0,29(2)
2011	Fe XVII & Fe XVI (1)	$I_{3D\&C} / I_B$	0,60(6)
		I_{3C} / I_B	0,71(7)
		I_{3D} / I_B	0,32(6)
		I_{3C} / I_{3D}	2,32(45)
2011	Fe XVII & Fe XVI (2)	$I_{3D\&C} / I_B$	0,59(5)
		I_{3C} / I_B	0,73(7)
		I_{3D} / I_B	0,30(5)
		I_{3C} / I_{3D}	2,50(46)
2011	Fe XVII & Fe XVI (3)	$I_{3D\&C} / I_B$	0,62(4)
		I_{3C} / I_B	0,70(5)
		I_{3D} / I_B	0,33(5)
		I_{3C} / I_{3D}	2,13(30)
2011	Fe XVII & Fe XVI (4)	$I_{3D\&C} / I_B$	0,68(5)
		I_{3C} / I_B	0,72(5)
		I_{3D} / I_B	0,39(5)
		I_{3C} / I_{3D}	1,86(23)
2011	Fe XVII & Fe XVI (5)	$I_{3D\&C} / I_B$	0,52(5)
		I_{3C} / I_B	0,58(5)
		I_{3D} / I_B	0,23(6)
		I_{3C} / I_{3D}	2,68(73)
2011	Fe XVII & Fe XVI (6)	$I_{3D\&C} / I_B$	0,45(4)
		I_{3C} / I_B	0,67(7)
		I_{3D} / I_B	0,16(4)
		I_{3C} / I_{3D}	4,36(1,29)
2012	Fe XVI	I'_C / I'_B	0,30(4)
2012	Fe XVII & Fe XVI	$I_{3D\&C} / I_B$	0,88(7)
		I_{3C} / I_B	1,46(11)
		I_{3D} / I_B	0,58(9)
		I_{3C} / I_{3D}	2,53(41)

Bei der ersten Kampagne wurde der Anteil der Unterteilung in Intensitätsklassen am Gesamtfehler zu etwa 10% abgeschätzt. Die übrigen 90% verteilten sich mit 63% auf den Abzug von C und 27% auf den rein statistischen Fehler der Intensitäten von 3C und 3D&C. Die entsprechenden Werte bei der zweiten Kampagne betrugen 20%, 58% und 22%. Es wird deutlich, daß die Notwendigkeit C abzuziehen den größten Teil des Gesamtfehlers verursacht.

Bezug der gemessenen Größe zu anderen Größen

Im Experiment wurde der Übergang vom Grundzustand in einen angeregten Zustand angeregt. Die Wahrscheinlichkeit für eine solche Anregung ist gegeben durch den Einstein-Koeffizienten B_{ik}^v . Die Abregung bei 3C und 3D erfolgt schnell und fast ausschließlich radiativ. Selbst wenn die Abregung schrittweise über tiefer liegende Energieniveaus erfolgen würde, wird der letzte Abregungsschritt in den Grundzustand erfolgen. Die Energie eines dabei abgestrahlten Photons liegt so nahe an der Resonanzenergie der Übergänge 3C und 3D, daß die Fluoreszenz ebenfalls erfasst und gezählt wird. Das gemessene Intensitätsverhältnis ist also das Verhältnis der Anregungsraten und damit der Einstein-Koeffizienten der Absorption.

Wie in Abschnitt 2.1, Unterabschnitt „An- und Abregungsprozesse“ angesprochen, gibt es neben B_{ik}^v eine ganze Reihe unterschiedlicher Größen, in denen die Stärke eines Übergangs ausgedrückt werden kann. Gerade beim Vergleich mit theoretischen Werten kann auch das Verhältnis von Oszillatorstärken herangezogen werden. Laut Gleichung 2.11 sind Oszillatorstärken proportional zu B_{ik}^v und zur Übergangsfrequenz ν_{ik} . Da sich die Übergangsfrequenzen von 3C und 3D unterscheiden, ist auch das Verhältnis der Oszillatorstärken prinzipiell nicht gleich dem Intensitätsverhältnis. Jedoch ist der Quotient der Frequenzen fast gleich eins. Der Unterschied zwischen beiden Verhältnissen beträgt etwa 1,6% und ist im Rahmen des experimentellen Fehlers, zumal bei der deutlich größeren Differenz von Experiment und Theorie, zu vernachlässigen.

Beim Vergleich mit durch Elektronenstoßanregung gewonnenen Intensitätsverhältnissen kann Gleichung 2.2 herangezogen werden. Der Gaunt-Faktor, der in den Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung eingeht ist eine schwach von der kinetischen Energie der Elektronen abhängende Funktion, die die gesamte am Stoßprozess beteiligte Physik beinhaltet. Die Bethe-Approximation deutet darauf hin, daß die Übergangsraten näherungsweise proportional zur Oszillatorstärke sind [117]. Bis zu einem gewissen Grad sollte also ein Vergleich mit durch Elektronenstoßanregung gewonnenen Werten möglich sein. Diese Interpretation wird gestützt durch Rechnungen mit dem Flexible Atomic Code [9, 53], bei denen basierend auf den selben Wellenfunktionen sowohl die radiative Übergangsrate A_r , als auch der Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung berechnet wurden. Die Ergebnisse dieser Rechnung sind in Tabelle 5.4 aufgeführt. Es zeigt sich, daß die Verhältnisse von Übergangsraten und Wirkungsquerschnitten nahe bei

Tabelle 5.4. Aufgeführt sind mit FAC [53] gerechnete radiative Übergangsraten (A_r) und Wirkungsquerschnitte für Elektronenstoßanregung (σ_{EA}) für die Linien 3C und 3D, sowie das jeweilige Verhältnis. Die Rechnung wurde für unterschiedlich starke Mischung durchgeführt. Die Zahlen in Klammern geben die Anzahl jeweils berücksichtigter Konfigurationen an.

Größe		3C	3D	Verhältnis
A_r in Hz	(36)	$2,46 \cdot 10^{13}$	$5,92 \cdot 10^{12}$	4,16
σ_{EA} in cm^2	(36)	$1,22 \cdot 10^{-19}$	$3,36 \cdot 10^{-20}$	3,63
A_r in Hz	(962)	$2,33 \cdot 10^{13}$	$5,95 \cdot 10^{12}$	3,92
σ_{EA} in cm^2	(962)	$1,16 \cdot 10^{-19}$	$3,37 \cdot 10^{-20}$	3,44

einander liegen. Ein direkter Vergleich ist über die Betrachtung von Tendenzen hinaus nicht sinnvoll. Eine solche Tendenz ist, daß größere Wirkungsquerschnitte auch zu größeren Übergangsraten führen. Ein wie auch immer gearteter Effekt auf die Übergangsraten schlägt sich also wahrscheinlich in einer vergleichbaren Änderung des Wirkungsquerschnitts nieder. Eine direkte Messung des Oszillatorstärkenverhältnisses, wie hier demonstriert, erlaubt einen mit weniger systematischen Unsicherheiten behafteten Vergleich von Experiment und Theorie.

Vergleich mit bisherigen Messungen und Rechnungen

In Tabelle 5.5 und in Abbildung 5.12 wird das gefundene 3C/3D-Verhältnis mit einer Auswahl vorheriger Messungen verglichen. Bei einem solchen Vergleich muss beachtet werden, daß üblicherweise der Beitrag der Linie C vernachlässigt wurde. Es ist daher sinnvoll nur den jeweils größten an einer Quelle gemessenen Wert zum Vergleich heranzuziehen, da bei diesem wahrscheinlich der Beitrag von C am kleinsten ist. Bei den beiden aufgeführten EBIT-Messungen vom LLNL [20] beziehungsweise vom NIST [48] wurde außerdem ein gepulstes Injektionsverfahren (MeVVA, engl. Metal Vapour Vacuum Arc) eingesetzt, bei dem mit einer hohen Reinheit des erzeugten Ladungszustands zu rechnen ist.

Die mit Tokamak und EBITs gefundenen Werte sind prinzipiell mit dem für diese Arbeit gemessenen vereinbar, weichen aber tendenziell zu leicht höheren Werten hin ab. Die beste Übereinstimmung zeigen die Messungen von Gillaspay [48]. Der maximale Wert von Brown [19] ist mit dem angegebenen Fehler gerade nicht mit einer $1-\sigma$ -Abweichung kompatibel. Ein direkter Vergleich ist jedoch nicht möglich, da die Anregung der Übergänge in bisherigen Experimenten durch Elektronenstoß erfolgte und nicht durch Photonen. Die selben Einschränkungen bei der Vergleichbarkeit treffen auch für die ebenfalls in Tabelle 5.5 aufgeführten aus astrophysikalischen Quellen stammenden Intensitätsverhältnisse zu. Es kann nur eine tendenziell gute Übereinstimmung festgestellt werden.

Tabelle 5.5 enthält außerdem eine Reihe theoretischer Linienverhältnisse, die mit

Tabelle 5.5. Eine Aufstellung gemessener und gerechneter Werte für das Intensitätsverhältnis der Linien 3C und 3D. Im oberen Teil der Tabelle sind zusammen mit dem im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Wert Messungen an Laborplasmen und aus astronomischen Beobachtungen gewonnene Werte aufgeführt. Messungen, bei denen die Verfälschung der Intensität von 3D durch die Fe-XVI-Linie C nicht berücksichtigt wurde, sind mit * gekennzeichnet. Im den unteren Tabellenabschnitten sind die Ergebnisse verschiedener Rechnungen zusammengestellt. Bei den Rechnungen von Harman [58] sind die Ergebnisse für zwei unterschiedliche Anzahlen berücksichtigter Konfigurationen und ein extrapolierter Wert angegeben.

Quelle	Methode/Objekt	Verhältnis 3C/3D
diese Arbeit	EBIT, Laserspektroskopie	2,61(23)
Beiersdorfer (2004) [8]	Tokamak*	2,04(42) – 3,33(56)
Brown (2001) [20]	EBIT, konventionell*	1,90(11) – 3,04(12)
Gillaspy (2011) [48]	EBIT, konventionell*	1,96(14) – 2,78(11)
Blake (1965) [16]	Sonne*	1,63
McKenzie (1980) [86]	Sonne*	2,75
Mewe (2001) [87]	Capella*	2,42
Behar (2001) [4]	Capella*	3,02
Xu (2002) [119]	NGC4636*	2,31(18)
Bhatia (1985) [14]	Distorted Wave	5,01
Bhatia (1992) [15]	Distorted Wave	4,50
Cornille (1994) [26]	Distorted Wave	4,52
Gu (2009) [54]	Distorted Wave	4,03
Chen (2007) [45]	Dirac-R-Matrix, konvergiert	3,54
Safronova (2001) [99]	MBPT	3,43
Gu (2009) [54]	MBPT + Distorted Wave	3,50
Harman (2012) [58]	MCDF, 96 Konfigurationen	4,00
Harman (2012) [58]	MCDF, 89070 Konfigurationen	3,51
Harman (2012) [58]	MCDF, extrapoliert	3,49

unterschiedlichen Ansätzen gewonnen wurden. Abbildung 5.12 ist eine grafische Darstellung der aufgeführten Werte im Vergleich zu dem im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen. Die wichtigste Feststellung ist, daß ausnahmslos alle Theoriewerte höher liegen und dabei deutlich außerhalb des Fehlerbalkens. Damit bestätigen sich die schon in der Einleitung angesprochenen systematischen Abweichungen der Theorie vom Experiment (siehe Seite 15). Das Problem besteht also weiterhin, auch wenn die Anregung der Übergänge rein photonisch erfolgt.

Bisher publizierte Rechnungen konzentrierten sich auf die Anregung durch Stoß mit Elektronen. Das lag nahe, da alle verfügbaren experimentellen Daten unter Stoßanregung gemessen worden waren. Ein verbreiteter Ansatz für solche Rechnungen ist die sogenannte Distorted-Wave-Methode, bei der oft nur schlecht konvergierte Näherungen für die Wellenfunktionen zum Einsatz [14, 15, 26] kom-

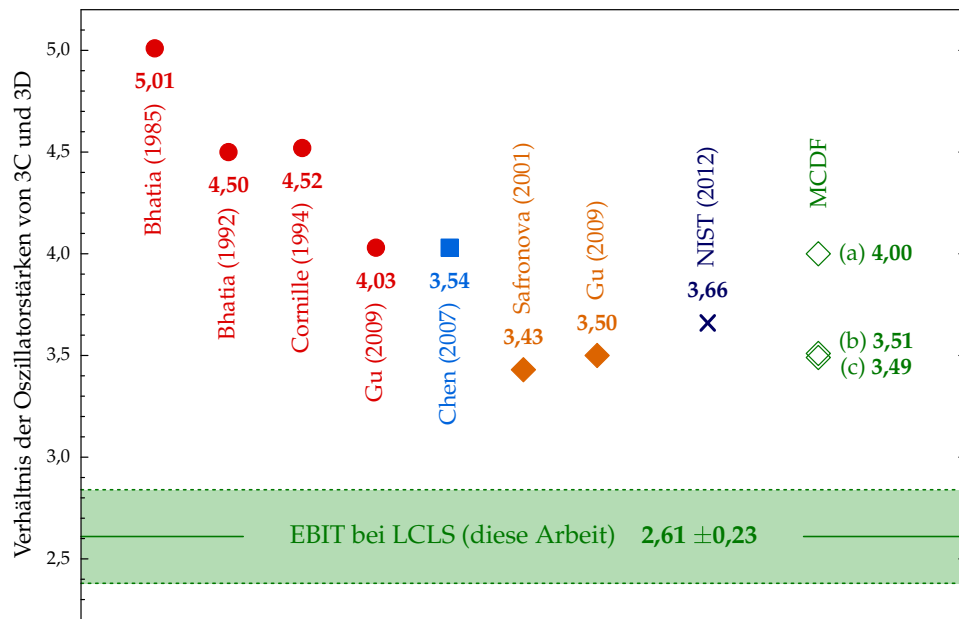


Abbildung 5.12. Vergleich des gemessenen 3C/3D-Verhältnisses mit gerechneten Werten. Der experimentelle Wert inklusive einer Standardabweichung ist als grünes Band eingezeichnet. Die roten Punkte entsprechen Werten, die unter Verwendung von Wellenfunktionen gerechnet wurden, die eine Mischung von Elektronenzuständen nicht in besonderer Weise berücksichtigen. Das blaue Quadrat kennzeichnet das Resultat einer vollständig konvergierten Dirac-R-Matrix-Rechnung. Die orangen gefüllten Rauten stehen für Rechnungen nach der Many-Body-Perturbation-Theory (MBPT), welche explizit auf die Berücksichtigung von Mischungen hin optimiert wurde. Zum Vergleich ist außerdem der vom NIST empfohlene Wert angegeben (dunkelblaues Kreuz). Die offenen grünen Rauten entsprechen den Werten, die mit großskaligen Multi-Configuration-Dirac-Fock-Rechnungen gewonnen wurden, bei denen Mischungen zwischen 716 (a) und 89070 (b) elektronischen Konfigurationen berücksichtigt wurden. Weiterhin ist der durch Extrapolation zu vollständiger Mischung hin erhaltene Wert gezeigt (c). Die Quellen der einzelnen Werte sind in Tabelle 5.5 angegeben.

men.

Die letzten Rechnungen von Chen basieren hingegen auf dem voll relativistischen Dirac-R-Matrix-Ansatz [45]. Sie berücksichtigen bei der Konstruktion von Wellenfunktionen in besonderer Weise Elektron-Elektron-Korrelationen. Es wurde sichergestellt, daß das Verfahren komplett konvergierte. Der letztendlich berechnete Wert für das 3C/3D-Verhältnis liegt mit 3,54 deutlich näher am Experiment.

Weitere Rechnungen verwenden die MBPT [54, 99], um Wellenfunktionen zu konstruieren. Von Gu wurden zum Vergleich sowohl konventionelle Distorted-Wave-Rechnungen durchgeführt, als auch Rechnungen, bei denen die per MBPT gewonnenen Wellenfunktionen zum Einsatz kamen [54]. Es zeigte sich, daß das Verhältnis 3C/3D auf diese Weise von 4,03 auf 3,50 gesenkt werden konnte.

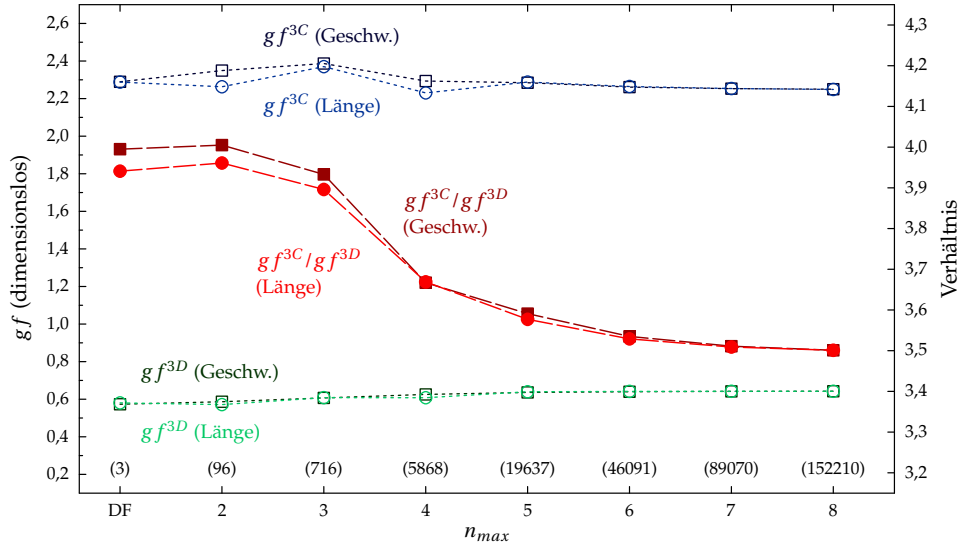


Abbildung 5.13. Ergebnisse von großskaligen MCDF-Rechnungen. Gezeigt sind die gewichteten Oszillatorstärken gf der zu den Linien 3C (blau gestrichelt) und 3D (grün gestrichelt) gehörigen Übergänge. Sie sind aufgetragen über die maximale bei der Rechnung verwendete Hauptquantenzahl n_{\max} . An der horizontalen Achse ist die Anzahl der jeweils berücksichtigten Konfigurationen in Klammern angegeben. Außerdem zu sehen ist das sich ergebende Verhältnis der Oszillatorstärken. Alle Werte sind jeweils in relativistischer Längen- und Geschwindigkeitseichung dargestellt.

Großskalige MCDF-Rechnungen

Um den Einfluss der verwendeten Wellenfunktionen auf das Endergebnis näher zu untersuchen wurden für die vorliegende Arbeit von Harman ausführliche MCDF-Rechnungen durchgeführt [58]. Dafür wurde das Paket „grasp2K“ [68] verwendet. Das Verfahren liefert genäherte Eigenfunktionen des relativistischen Viel-Elektronen-Hamilton-Operators, unter Berücksichtigung der relativistischen Breit-Wechselwirkung und Massenverschiebungen. Elektron-Elektron-Wechselwirkungen sind enthalten. Die Eigenfunktionen werden dabei entwickelt nach den Zuständen, die durch ein- und zweifachen Elektronenaustausch erreicht werden können. Die Anzahl solcher Zustände hängt ab von den dabei berücksichtigten Orbitalen. Es wurden Orbitale bis zur Hauptquantenzahl $n_{\max} = 8$ berücksichtigt.

Um die Abhängigkeit des gefundenen Verhältnisses der Oszillatorstärken von 3D und 3D von n_{\max} zu untersuchen, wurde n_{\max} in Schritten von 2 auf 8 erhöht. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.13 gezeigt. Das Verhältnis verändert sich von 4,00 bei $n_{\max} = 2$ zu 3,51 bei $n_{\max} = 8$. In letzterem Fall sind sowohl die Oszillatorstärken als auch deren Verhältnis nahezu vollständig konvergiert. Die Werte wurden für den Fall $n_{\max} \rightarrow \infty$ extrapoliert und es ergab sich ein Verhältnis von 3,49. Der beobachtete Effekt entspricht fast exakt dem weiter oben beschriebenen, der von Gu beobachtet wurde, als MBPT-Resultate konventionellen Wellenfunktionen ge-

genübertgestellt wurden.

Interpretation

Es hat sich gezeigt, daß die Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie beim Intensitätsverhältnis der Linien 3C und 3D auch dann weiterhin besteht, wenn die Übergänge mit Photonen direkt angeregt werden und Stoßeffekte keine Rolle spielen. Daraus kann geschlossen werden, daß die Ursache hierfür höchstwahrscheinlich direkt bei den in den Rechnungen verwendeten Wellenfunktionen zu suchen ist.

Alle Ansätze, die näher am experimentellen Wert liegen, haben gemeinsam, daß in ihnen die Wellenfunktionen auf eine Weise konstruiert werden, die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen berücksichtigt. Dies wird besonders deutlich bei den für die vorliegende Arbeit durchgeführten MCDF-Rechnungen, die eine starke Abhängigkeit des Oszillatorstärkenverhältnisses von der Anzahl berücksichtigter Elektronenkonfigurationen aufzeigen. Der MBPT-Ansatz wurde bisher bis zur zweiten Ordnung der Störungstheorie angewandt. Es ist unwahrscheinlich, daß das Verfahren schon in solch niedriger Ordnung vollständig konvergiert. Eine Rechnung, die Terme höherer Ordnung berücksichtigt, könnte eventuell das vorhergesagte Verhältnis weiter absinken lassen.

Es liegt der Schluß nahe, daß die bisherige Vorgehensweise bei Atomstrukturrechnungen Effekte vernachlässigt, die entscheidend in das Linienverhältnis von 3C und 3D eingehen. Wie angedeutet gibt es Anzeichen dafür, daß diese zumindest teilweise aus Elektron-Elektron-Wechselwirkungen stammen. Diese Wechselwirkungen drücken sich in den resultierenden Wellenfunktionen dadurch aus, daß sie eine Linearkombination aus den Wellenfunktionen der wechselwirkenden Elektronenkonfigurationen sind. Die Wellenfunktion des angeregten Zustands beim Übergang 3C enthält also auch Anteile anderer Wellenfunktionen. Diese Anteile werden ausgedrückt durch die sogenannten Mischungskoeffizienten. Laut MCDF-Rechnung trägt 3C zu 3D mit einem Koeffizienten von etwa 0,2 bei und 3D zu 3C mit etwa 0,18 [59]. Auch andere Niveaus tragen zu 3C und 3D bei. Zum Beispiel ist der Anteil des zur 3E genannten Linie gehörigen Niveaus an 3D laut Rechnung sogar 0,25. Unter Umständen werden in gängigen theoretischen Behandlungen der Übergangsraten die Einflüsse der Mischung elektronischer Konfigurationen unterschätzt.

Es ist unklar, welche Effekte in die Theorien aufgenommen werden müssen, um eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment zu erzielen. Vielleicht ist ein besseres Verständnis der Zustandsmischung ausreichend. Vielleicht müssen aber auch quantenelektrodynamische Beiträge berücksichtigt werden, oder es ist der Punkt erreicht, an dem zeitunabhängige Näherungen der Wellenfunktionen den Anforderungen nicht mehr genügen und durch dynamische Betrachtungen abgelöst werden sollten.

Kapitel 6

Rekapitulation und Ausblick

Men and women are not content to comfort themselves with tales of gods and giants, or to confine their thoughts to the daily affairs of life; they also build telescopes and satellites and accelerators, and sit at their desks for endless hours working out the meaning of the data they gather. The effort to understand the universe is one of the very few things that lifts human life a little above the level of farce, and gives it some of the grace of tragedy.

— Steven Weinberg

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Elektronenstrahlionenfalle in Kombination mit einem Freie-Elektronen-Laser dazu eingesetzt, erstmalig die Methoden der Laserspektroskopie im Energiebereich um 800 eV anzuwenden. Es wurden so verschiedene hohe Ladungszustände von Eisen spektroskopisch untersucht. Einerseits wurden auf diese Weise präzise Messungen relativer und absoluter Resonanzenergien durchgeführt. Andererseits wurde das Intensitätsverhältnis der zwei starken Fe-XVII-Linien 3C und 3D gemessen, um ein neues Licht auf eine seit 1973 bestehende Diskrepanz zwischen astronomischer Beobachtung und Laborexperiment auf der einen Seite und einer ganzen Reihe Modellrechnungen auf der anderen zu werfen.

Eine EBIT als Endstation für LCLS

Die transportable FLASH-EBIT wurde in eine Endstation für den Freie-Elektronen-Laser LCLS in Kalifornien umgerüstet. Insbesondere wurden Techniken entwickelt, die eine schnelle Herstellung des notwendigen Überlapps von Photonenstrahl und Ionenwolke ermöglichten. Diese wurden inzwischen auch erfolgreich bei einer Reihe weiterer Experimente an den Synchrotronen BESSY II [111] und PETRA III [98, 111] angewandt.

Es wurde sowohl zur Experimentsteuerung als auch zur Verarbeitung und Auswertung der gewonnenen Daten Software entwickelt. Die entwickelten Algorithmen

erlaubten unter anderem, systematische Einflüsse auf die gemessenen Resonanzenergien zu quantifizieren und zu korrigieren. Ein Teil der Software wird auch bei zukünftigen Experimenten zum Einsatz kommen können.

Es wurden eine Reihe verschiedener Detektortypen als Fluoreszenzdetektoren erprobt. Es haben sich Germaniumdetektoren als für die Messung von Fluoreszenzraten besonders geeignet herausgestellt, da die Erfassung von Ankunftszeit und deponierter Energie parallel eine effektive Untergrundunterdrückung durch Zeitkoinzidenz und die Rekonstruktion der Anzahl gleichzeitig detektierter Photonen erlaubt. Außerdem wurde erfolgreich ein MCP-Detektor eingesetzt, der durch seine größere Detektionsfläche eine wesentlich höhere Signalrate aufwies. Ebenfalls erfolgreich getestet wurde der Einsatz eines Mikrokalorimeters. In Zukunft könnten solche Detektoren eingesetzt werden, wenn eine Untergrundunterdrückung durch Zeitkoinzidenz nicht möglich ist. Die Trennung des Signals vom Untergrund könnte dann unter Ausnutzung der hohen Energieauflösung eines Kalorimeters erfolgen.

Die Messungen in dieser Arbeit waren zum Zeitpunkt der Durchführung nur bei LCLS möglich. Als einziger FEL produziert LCLS Photonen mit den benötigten Energien um 800 eV. Die hohen Photonenflüsse in Kombination mit der Möglichkeit den SXR-Monochromator parallel zur FEL-Energie zu verfahren erlaubten Zählraten im Bereich von einigen Hz. Insbesondere aber weist nur LCLS eine Zeitstruktur auf, die es erlaubte, die Fluoreszenz in Zeitkoinzidenz mit den Schüssen des FEL zu detektieren. Erst dadurch war es möglich, das Fluoreszenzsignal vom durch Elektronenstoßanregung hervorgerufenen Untergrund zu trennen.

Resonanzenergien

Es war möglich, die Resonanzenergien mehrerer Linien aus Magnesium- bis Neonartigem Eisen mit einer Präzision zu messen, die höher war, als die der derzeit verfügbaren theoretischen Werte. Präzise Resonanzenergien werden zum Beispiel in der Astrophysik benötigt, um aus der Rot- beziehungsweise Blauverschiebung der Linien in beobachteten Spektren auf die Relativgeschwindigkeit des emittierenden Objekts zum Beobachter zu schließen. Die Genauigkeit solcher Geschwindigkeitsbestimmungen ist derzeit beschränkt durch die verfügbaren Werte für Resonanzenergien im Ruhesystem. Sind keine Labormessungen dieser Energien verfügbar, so ist man auf theoretische Werte angewiesen. Diese weisen jedoch eine Unsicherheit in der Größenordnung von 1 eV auf, was bei Übergängen im Bereich um 1 keV Geschwindigkeitsunsicherheiten von $3 \cdot 10^5$ m/s entspricht. Bei Verwendung der in dieser Arbeit gemessenen Resonanzenergien sind um einen Faktor vier genauere Geschwindigkeitsbestimmungen möglich. Die experimentellen Unsicherheiten waren dominiert von einem systematischen Fehler. Dieser stammte von Instabilitäten des verwendeten Monochromators. In Zukunft könnte durch den Einsatz eines anderen Monochromators die Genauigkeit deutlich gesteigert werden.

Es könnte auch möglich werden, auf einen Monochromator gänzlich zu verzichten. Bei LCLS basiert der Strahlungserzeugungsprozess auf selbstverstärkender spontaner Emission (SASE). Die dabei verstärkte Strahlung stammt aus dem am Anfang des Undulators herrschenden Strahlungsrauschen. Wegen seines Ursprungs in einem stochastischen Prozess, weist ein SASE-Spektrum eine chaotische Unterstruktur auf (siehe auch Abbildung 3.7). Es wurde jüngst gezeigt, daß es möglich ist, LCLS in einem sogenannten „seeded“ Modus zu betreiben [2]. Dabei wird die in der ersten Hälfte des Undulators per SASE erzeugte Strahlung dazu verwendet, den Strahlungserzeugungsprozess in der zweiten Undulatorhälfte so zu beeinflussen, daß die Verstärkung nicht mehr aus dem Rauschen heraus erfolgt, sondern die gewünschte Wellenlänge aufgeprägt bekommt. Dergestalt ist es bereits gelungen bei 8 keV eine Bandbreite von weniger als 0,5 eV zu erzielen [2]. Durch die Konzentration in ein schmaleres Frequenzband steigt gleichzeitig die Intensität des FEL. Der „seeded“ Betrieb verspricht für die Zukunft höhere Auflösungsvermögen bei laserspektroskopischen Messungen, selbst ohne Monochromator.

Oszillatorstärken

Das demonstrierte Verfahren macht es erstmalig möglich, die Unsicherheiten bei der Bestimmung von Oszillatorstärkenverhältnissen, die bei Anregung per Elektronenstrahl zwangsläufig entstehen, vollständig zu eliminieren. Das derart ermittelte Verhältnis der Oszillatorstärken der Übergänge 3C und 3D in Fe XVII ist verträglich mit bisherigen Messungen und Beobachtungen, bei denen die Anregung immer durch Elektronenstoß erfolgte. Damit bleibt die Diskrepanz zu verfügbaren Modellrechnungen bestehen und es kann geschlossen werden, daß diese in der theoretischen Behandlung der elektronischen Struktur der einzelnen Ionen verwurzelt liegt, und nicht in kollektiven Plasmaeffekten oder Stoßprozessen.

Der experimentelle Fehler hängt zu einem gewissen Teil von der Zählstatistik ab. Eine Verbesserung ist durch höhere Photonenflüsse, sowie längere Messzeiten zu erreichen. Höhere Photonenflüsse wären durch den Wegfall des Monochromators und die geringere spektrale Bandbreite in einem „seeded“ Betrieb verfügbar. Auch großflächigere Fluoreszenzdetektoren bieten hier Spielraum für Verbesserungen. Dies wurde durch die Verwendung eines MCP-Detektors mit einem Durchmesser von 45 Millimetern bereits demonstriert. Um auch für die Messung von Oszillatorstärken dienen zu können, ist jedoch eine Möglichkeit die Anzahl gleichzeitig detektierter Photonen bestimmen zu können essentiell. Dies kann, wie im Rahmen dieser Arbeit mit Germaniumdetektoren gezeigt, durch den Einsatz energieauflösender Detektoren stattfinden. Eine andere Möglichkeit wäre, anstelle eines großen Detektors mehrere kleine Detektoren zu verwenden. Eine einfache Realisierung eines solchen Ansatzes wäre ein MCP-Detektor mit einer segmentierten Anode, bei der die Segmente jeweils einzeln ausgelesen werden.

Eine weitere Fehlerquelle ist die Schwankung des Photonenflusses und die damit einhergehende Notwendigkeit, die Intensität jedes einzelnen FEL-Schusses zu messen und die gemessenen Fluoreszenzraten zu korrigieren. Einerseits wäre es wünschenswert, den Photonenfluss technisch möglichst konstant zu halten, andererseits wurde für die vorliegende Arbeit ein Verfahren entwickelt, das eine Korrektur gegen Intensitätsschwankungen erlaubt, wenn ein Signal zur Verfügung steht, das eine monotone Abhängigkeit von der Intensität aufweist. Der Prozess der Spektrengewinnung würde deutlich vereinfacht, wenn die tatsächliche Intensität jedes Schusses bekannt wäre.

Durch die beschriebenen Verbesserungen könnte der absolute Fehler bei der Bestimmung von Oszillatorstärkenverhältnissen voraussichtlich um einen Faktor zehn reduziert werden. Der konsequente nächste Schritt bestünde in der Messung der absoluten Oszillatorstärken. Eine Möglichkeit hierzu wäre, die natürlichen Linienbreiten von Resonanzen zu messen. Dazu wäre der Einsatz eines Monochromators mit sehr hohem Auflösungsvermögen notwendig.

Neue Möglichkeiten

EBITs sind für laserspektroskopische Untersuchungen außerordentlich gut geeignet. Die Möglichkeit, einen Laser mit einer in einer Richtung ausgedehnten Ionenwolke zum Überlapp zu bringen, und Ionen prinzipiell aller Elemente und Ladungszustände zur Verfügung zu stellen, erlaubt eine Vielzahl zukünftiger Experimente. Wie schon von Epp [40–42] im VUV, sowie von Mäckel [82, 83] und Schnorr [102] bei sichtbaren Wellenlängen demonstriert, ist es jetzt auch im Röntgen-Bereich möglich die Techniken der Laserspektroskopie an hochgeladenen Ionen in einer EBIT anzuwenden. Damit eröffnet sich die Perspektive, in Zukunft einige der sehr erfolgreichen und hochpräzisen Messschemata der optischen Laserspektroskopie in den Röntgen-Bereich zu übernehmen.

Für Laserspektroskopie mit Röntgen-Licht bieten hochgeladene Ionen eine Reihe Vorteile, die vornehmlich von der tiefen Bindung der Hüllenelektronen im Kernpotential herrühren. So überstehen hochgeladene Ionen auch die Bestrahlung mit Laserlicht vergleichsweise hoher Intensität, ohne ihren Ladungszustand zu ändern. Der Auger-Zerfallskanal ist deutlich unterdrückt. Auch für Präzisionsspektroskopie sind hochgeladene Ionen ein lohnenswerter Untersuchungsgegenstand. Sie besitzen teilweise metastabile Niveaus mit Lebensdauern in der Größenordnung von Sekunden und damit einhergehenden sehr kleinen natürlichen Linienbreiten.

Zur Energiekalibration der aufgenommenen Spektren wurden Übergänge Wasserstoff-artiger Ionen herangezogen. Da die Resonanzenergien elektrischer Dipolübergänge etwa mit Z^2 skalieren, existieren Übergänge in Wasserstoff-artigen Ionen bei Energien von 10 bis 90000 eV. Dazu kommen weitere Übergänge in hochgeladenen Ionen unterschiedlichster Elemente und Ladungszustände. Liegen für diese einmal präzise Messungen vor, so könnten sie in Zukunft zur Energiekalibra-

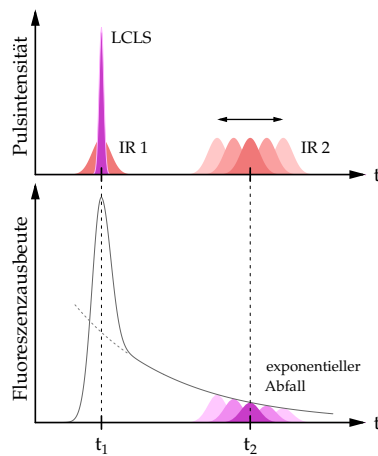


Abbildung 6.1. Ein mögliches Schema zur Messung der Lebensdauer eines metastabilen angeregten Zustands. Ionen werden mit einem Röntgen-Puls von LCLS über einen erlaubten elektrischen Dipolübergang angeregt. Ein zeitgleicher Infrarotpuls (IR 1) transferiert einen Teil der angeregten Population in einen benachbarten metastabilen Zustand. Nachdem alle nicht transferierten Ionen in den Grundzustand zurückgekehrt sind, kann die Population im metastabilen Zustand mit einem zweiten Infrarotpuls (IR 2) angesprochen und in den ursprünglich angeregten Zustand zurücktransferiert werden. Das bei der Abregung aus diesem Zustand entstehende Fluoreszenzsignal fällt als Funktion der seit der Anregung verstrichenen Zeit mit der Besetzung des metastabilen Zustands ab.

tion von Röntgen-Strahlungsquellen wie FELs und Synchrotronen herangezogen werden. Ein solcher Ansatz besitzt gegenüber der Verwendung von Kristallspektrometern oder Messungen der Absorptionskanten von Festkörpern den Vorteil, unabhängig von Geometrien und Materialkonstanten zu sein, die von Umweltfaktoren, wie zum Beispiel der Temperatur, beeinflusst werden können. Es erscheint sinnvoll, hochgeladene Ionen als atomare Frequenzreferenz im Röntgen-Bereich zu verwenden.

Schemata mit zwei oder mehr Laserpulsen könnten zur Messung der Lebensdauern metastabiler Zustände dienen. Befindet sich ein Teil der Ionen in der Falle nach einem ersten Röntgen-Puls in einem angeregten Zustand, dann kann ein zweiter Röntgen-Puls diese Ionen nicht noch einmal anregen. Die Fluoreszenzausbeute beim zweiten Puls ist demnach schwächer. Misst man diese nun als Funktion des zeitlichen Abstandes zwischen beiden Pulsen, dann wäre es möglich, auf die Lebensdauer des angeregten Zustandes zu schließen. Bei LCLS existiert mit dem sogenannten „slotted spoiler“ (engl. für „geschlitzter Abweiser“) die Möglichkeit, aus einem Elektronenpaket zwei zu machen, die mit einem vorgegebenen zeitlichen Abstand von maximal einigen hundert Femtosekunden in den Undulator eintreten. Dadurch werden zwei Röntgen-Pulse generiert. Im Rahmen der beiden Messkampagnen wurde bereits versucht, diese Möglichkeit zur Messung von Lebensdauern mit dem oben beschriebenen Pump-Probe-Verfahren einzusetzen. Es zeigte sich jedoch, daß der Einsatz des „slotted spoiler“ mit einer starken Reduzierung des Photonenflusses einhergeht. Auch ist bisher unklar, welche Intensitäten die beiden Einzelpulse aufweisen. Es scheint sinnvoll, für derartige Experimente in Zukunft andersartige Technologien, wie zum Beispiel präzise Verzögerungsstrecken für Röntgen-Pulse, einzusetzen.

Ein anderes mögliches Experiment verwendet einen FEL in Kombination mit einem konventionellen Laser. Dabei wird ein Röntgen-Puls dazu verwendet einen

erlaubten elektrischen Dipolübergang anzuregen. Ein synchroner Puls eines konventionellen Lasers wird dazu verwendet, einen Teil der angeregten Ionen in einen benachbarten metastabilen Zustand zu versetzen. Nachdem alle nicht in den metastabilen Zustand transferierten Ionen durch Abregung in den Grundzustand zurückgekehrt sind, folgt ein zweiter Puls vom konventionellen Laser, der nun Ionen vom metastabilen in den ursprünglich angeregten Zustand zurückversetzt, aus dem sie in den Grundzustand zurückkehren können. Die dabei auftretende Fluoreszenz kann detektiert werden. Die Stärke des so gemessenen Signals hängt ab von der Anzahl im metastabilen Zustand verbliebener Ionen. Da diese exponentiell mit der Zeit abfällt, wobei die Geschwindigkeit dieses Abfalls von der Lebensdauer des metastabilen Zustands abhängt, kann aus der als Funktion des zeitlichen Abstands zwischen den beiden Pulsen vom konventionellen Laser direkt auf diese Lebensdauer geschlossen werden. Das Prinzip ist in Abbildung 6.1 illustriert. Ein solches Experiment wurde bereits vorgeschlagen [28]. Dabei soll per LCLS ein erlaubter $1s-2p$ -Übergang in Wasserstoff-artigem Neon angeregt werden. Ein Infrarot-Laser soll zum kohärenten Transfer von Ionen in einen metastabilen $2s$ -Zustand und zur späteren Abfrage von dessen Besetzung dienen.

Solche Experimente könnten den Weg bereiten für weitergehende Untersuchungen zum kohärenten Zustandstransfer und anderen quantenoptischen Phänomenen im Röntgen-Bereich. Diese können einen Zugang zu reproduzierbaren Standards bei sehr hohen Frequenzen gestatten, die mehrere Größenordnungen jenseits der zur Zeit in der Erprobungsphase befindlichen optischen Frequenzstandards lägen. Die Möglichkeit, solch hohe Frequenzen mit hoher Genauigkeit bestimmen zu können, würde zweifelsohne viele neue Möglichkeiten eröffnen, sowohl bei der Untersuchung fundamentaler Wechselwirkungen der Physik, als auch bei neuartigen technischen Anwendungen.

Symbole und Abkürzungen

In diesem Verzeichnis sind alle Symbole und Abkürzungen aufgeführt, die in dieser Arbeit verwendet wurden. Sie sind gruppiert in mathematische Konstanten, Naturkonstanten, Variablensymbole, Objektsymbole und Abkürzungen. Die Einträge in jeder dieser Gruppen sind alphabetisch sortiert. Griechische Buchstaben wurden dabei so einsortiert, wie die lateinischen Buchstaben, mit denen ihre jeweiligen Namen in lateinischer Schrift ausgeschrieben beginnen. Bei den Konstanten wurden zusätzlich zu den im Text vorkommenden, die Elementarladung e und die vereinheitlichte atomare Masseneinheit u aufgeführt, die für Rechnungen und Abschätzungen benötigt wurden. Die verwendeten Werte der Naturkonstanten stammen von CODATA [89].

Mathematische Konstanten

e	Eulersche Konstante 2,718281828...
π	Kreiszahl 3,141592653...

Naturkonstanten

a_0	Bohr-Radius $0,52917721092(17) \cdot 10^{-10} \text{ m}$
α	Feinstrukturkonstante $7,2973525698(24) \cdot 10^{-3}$
c	Lichtgeschwindigkeit $299792458 \text{ m s}^{-1}$
e	Elementarladung $1,602176565(35) \cdot 10^{-19} \text{ C}$

ε_0	Dielektrizitätskonstante des Vakuums $8,854187817 \dots \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
h	Plancksches Wirkungsquantum $6,62606957(29) \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
I_H	Ionisationspotential des Wasserstoffs $13,605692538(30) \text{ eV}$
k	Boltzmann-Konstante $1,3806488(13) \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
m_e	Ruhemasse des Elektrons $9,10938291(40) \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
u	vereinheitlichte atomare Masseneinheit $1,660538921(73) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Variablensymbole

a_i	Parameter der Lotz-Formel oder Funktionsparameter
$\alpha_{ik}(\nu)$	Absorptionskoeffizient
$ \alpha_i, J_i\rangle$	Zustandsvektor des Zustandes i mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl J_i
$ \alpha_i, J_i\rangle^*$	Zustandsvektor des angeregten Zustandes i mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl J_i
\mathcal{A}_{kq}	Ausrichtungparameter
A_r	radiative Übergangsrate
\vec{B}, B	magnetischer Feldvektor und dessen Betrag
$\vec{\beta}, \beta$	auf die Lichtgeschwindigkeit normierter Geschwindigkeitsvektor und dessen Betrag
b_i	Parameter der Lotz-Formel
B_{ik}^ν	Einstein-Koeffizient der Absorption
B_{ki}^ν	Einstein-Koeffizient der induzierten Emission
B_K	Magnetfeld an der Kathode
B_U	magnetische Feldamplitude im Undulator
c_i	Parameter der Lotz-Formel
d	Durchmesser der Ionenwolke
D	Abstand des Detektors von der Ionenwolke
δ	relative Abweichung des Elektronenstrahlstroms vom Sollwert
Δ	Gangunterschied
δE_γ^D	Dopplerverbreiterung
δ_{\max}	zur maximalen Fokusspannungsänderung gehörende relative Abweichung vom Sollwert des Elektronenstrahlstroms
$d\Omega$	differentielles Raumwinkelement

$dP/d\Omega$	Strahlungsleistung pro Raumwinkelement
Δt	Zeitschritt
ΔU	Fokusspannungsänderung
ΔU_{\max}	maximale Fokusspannungsänderung
D_x	von x aufgespannter Teil des Parameterraums
$\Delta x, \Delta y$	horizontale und vertikale Verschiebung
\vec{E}	elektrischer Feldvektor
η	Glättungsfaktor
E_B	Bindungsenergie
E_e	kinetische Energie eines Elektrons
E_i	Energie des Niveaus i
E_γ	Energie eines Photons
e_r	radialer Einheitsvektor
e_x, e_y	kartesische Einheitsvektoren in der x - y -Ebene
$f(a_i, \dots, a_n)$	Funktion
f_{ij}	Oszillatorstärke
f_k	Strukturfaktor
g	Gaunt-Faktor
γ	Lorentz-Faktor
gf	gewichtete Oszillatorstärke
g_i	statistisches Gewicht des Zustands i
$g_x(x)$	Wahrscheinlichkeitsdichte zum Wert x
I_e	Elektronenstrahlstrom
\bar{I}_e	numerisch geglätteter Elektronenstrahlstrom
I_e^S	Sollwert des Elektronenstrahlstroms
I_X	Intensität der Linie X
J_i	Gesamtdrehimpulsquantenzahl des Zustands i
k	Interferenzordnung oder Anzahl detektierter Photonen
$\langle k \rangle$	mittlere Anzahl detektierter Photonen
K	Undulatorparameter
k_i	Anzahl Elektronen in Schale i
L	Länge der Ionenwolke
λ_γ	Strahlungswellenlänge
λ_U	Undulatorperiode
m	Masse
M_{ik}	Übergangsmatrixelement
n	Hauptquantenzahl oder Anzahl Ereignisse
ν	Frequenz
ν_{ik}	Übergangsfrequenz zwischen den Niveaus i und k
n_{\max}	bei MCDF-Rechnungen berücksichtigte maximale Hauptquantenzahl

Ω	Larmor-Frequenz
φ	Winkelkomponente in Zylinderkoordinaten und Kugelkoordinaten
$\tilde{\varphi}$	Winkelkomponente in rotierenden Zylinderkoordinaten
Φ	elektrisches Potential
Φ_0	Raumladungspotentialfaktor
Φ_A	zusammengefasste Austrittsarbeiten
Φ_D	Driftröhrenpotential
Φ_I	Raumladungspotential der Ionen
P_{ik}	Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand i in den Zustand k
p_k^v	Wahrscheinlichkeit k Photonen nachzuweisen
Φ_K	Kathodenpotential
q	Ladung
\vec{r}, r	Radiusvektor und dessen Betrag oder Radius der Detektorfläche
r_D	Driftröhrenradius
ρ_e	Elektronenladungsdichte
r_H	Herrmann-Radius
$\rho(\nu)$	spektrale Energiedichte
r_K	Kathodenradius
σ_{EA}	Wirkungsquerschnitt der Elektronenstoßanregung
σ_{EI}	Wirkungsquerschnitt der Elektronenstoßionisation
S_{ik}	Linienstärke
σ_{ik}	Absorptionsquerschnitt
σ_x	Standardabweichung von x
t, τ	Zeiten
T	Temperatur
θ	Winkel zwischen Beobachter und Bewegungsrichtung
ϑ	Winkelkomponente in Kugelkoordinaten
T_K	Temperatur der Kathode
U	Beschleunigungsspannung
U_F	Fokusspannung
\vec{v}, v	Geschwindigkeitsvektor und dessen Betrag
$\langle v \rangle$	Betrag der mittleren Geschwindigkeit
$W(\vartheta, \varphi)$	Abstrahlcharakteristik
x	x -Koordinate oder aus zufallsverteilten Parametern abgeleitete Größe
$\langle x \rangle$	Mittelwert von x
y	y -Koordinate
$Y_{kq}(\vartheta, \varphi)$	Kugelflächenfunktionen
z	z -Koordinate
Z	Kernladungszahl

Z_{eff} effektive Kernladungszahl

Objektsymbole

e^- Elektron
 γ Photon
 $n\gamma$ ein oder mehrere Photonen
 X, X^{q+} Ion
 X^* Ion in einem angeregten Zustand

Abkürzungen

ADC engl. Analog-to-Digital Converter, Analog-zu-Digital-Wandler
AGN engl. Active Galactic Nuclei, aktive galaktische Kerne
ALS engl. Advanced Light Source
AMO engl. Atomic and Molecular Optics
BESSY Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotron-
strahlung
CFEL engl. Center for Free Electron Laser Science
CIDFS engl. Configuration-Interaction-Dirac-Fock-Sturmian
DESY Deutsches Elektronen-Synchrotron
EBIS engl. Electron Beam Ion Source, Elektronenstrahlionenquelle
EBIT engl. Electron Beam Ion Trap, Elektronenstrahlionenfalle
EPICS engl. Experimental Physics and Industrial Control System
FAC engl. Flexible Atomic Code
FEH engl. Far Experimental Hall
FEL engl. Free-Electron Laser, Freie-Elektronen-Laser
FLASH engl. Free-Electron Laser in Hamburg
HDF engl. Hierarchical Data Format
HPGe engl. High Purity Germanium, hochreines Germanium
HULLAC engl. Hebrew University / Lawrence Livermore Atomic Code
IGLET engl. Intrinsic Germanium Low Energy Type
IR Infrarot
K-B Kirkpatrick-Baez
Laser engl. Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation,
Lichtverstärkung durch stimulierte Emission von Strahlung
LCLS engl. Linac Coherent Light Source
LLNL engl. Lawrence Livermore National Laboratory

Ly- α	Übergang $n=2$ nach $n=1$ der <u>Ly</u> man-Serie
Ly- γ	Übergang $n=4$ nach $n=1$ der <u>Ly</u> man-Serie
MBPT	engl. <u>M</u> any <u>B</u> ody <u>P</u> erturbation <u>T</u> heory
MCDF	engl. <u>M</u> ulti- <u>C</u> onfiguration- <u>D</u> irac- <u>F</u> ock
MCP	engl. <u>M</u> icro- <u>C</u> hannel <u>P</u> late, Mikrokanalplatte
MPA	engl. <u>M</u> ulti- <u>P</u> arameter Data <u>A</u> cquisition
MPIK	<u>M</u> ax- <u>P</u> lanck- <u>I</u> nstitut für <u>K</u> ernphysik
NIST	<u>N</u> ational <u>I</u> nstitute of <u>S</u> tandards and <u>T</u> echnology
NEG	engl. <u>N</u> on- <u>E</u> vaporable <u>G</u> etter
NEH	engl. <u>N</u> ear <u>E</u> xperimental <u>H</u> all
PETRA	<u>P</u> ositron- <u>E</u> lektron- <u>T</u> andem- <u>R</u> ing- <u>A</u> nlage
PHA	engl. <u>P</u> ulse <u>H</u> eight <u>A</u> nalysis, Pulshöhenanalyse
PLT	engl. <u>P</u> rin ^c eton <u>L</u> arge <u>T</u> orus
RMBPT	engl. <u>R</u> elativistic <u>M</u> any <u>B</u> ody <u>P</u> erturbation <u>T</u> heory
ROSAT	<u>R</u> öntgen- <u>S</u> atellit
SASE	engl. <u>S</u> elf- <u>A</u> mplified <u>S</u> pontaneous <u>E</u> mission, selbstverstärkende spontane Emission
SIMES	engl. <u>S</u> tanford <u>I</u> nstitute of <u>M</u> aterial and <u>E</u> nergy <u>S</u> cience
SLAC	engl. <u>S</u> tanford <u>L</u> inear <u>A</u> ccelerator <u>C</u> enter
SVA	engl. <u>S</u> ampling <u>V</u> oltage <u>A</u> nalyzer, abtastender Spannungsanalyzer
SXR	engl. <u>S</u> oft <u>X</u> -ray <u>R</u> esearch Instrument for Materials Science
TDC	engl. <u>T</u> ime-to- <u>D</u> igital <u>C</u> onverter, Zeit-zu-Digital-Wandler
USB	engl. <u>U</u> niversal <u>S</u> erial <u>B</u> us
UV	<u>U</u> ltraviolett
VUV	<u>V</u> akuum- <u>U</u> ltraviolett
XMM	engl. <u>X</u> -ray <u>M</u> ulti- <u>M</u> irror
XRS	engl. <u>X</u> -ray <u>S</u> pectrometer
YAG	<u>Y</u> ttrium- <u>A</u> luminium- <u>G</u> arnet

Literaturverzeichnis

- [1] K. M. Aggarwal, F. P. Keenan & R. F. Heeter. *Energy levels, radiative rates and electron impact excitation rates for transitions in H-like N VII, O VIII, F IX, Ne X and Na XI*. Physica Scripta **82**, 015006 (2010).
- [2] J. Amann, W. Berg, V. Blank, F.-J. Decker, Y. Ding, P. Emma, Y. Feng, J. Frisch, D. Fritz, J. Hastings, Z. Huang, J. Krzywinski, R. Lindberg, H. Loos, A. Lutman, H.-D. Nuhn, D. Ratner, J. Rzepiela, D. Shu, Yu. Shvyd'ko, S. Spampinati, S. Stoupin, S. Terentyev, E. Trakhtenberg, D. Walz, J. Welch, J. Wu, A. Zholents & D. Zhu. *Demonstration of self-seeding in a hard-X-ray free-electron laser*. Nature Photonics **6**, 693–698 (2012).
- [3] Arduino Team. *Arduino Uno R2 (quelloffenes Mikrocontroller-Entwickler-board)* (2012). Dokumentation unter <http://www.arduino.cc>, abgerufen am 1. Februar 2013.
- [4] E. Behar, J. Cottam & S. M. Kahn. *The Chandra Iron-L X-Ray Line Spectrum of Capella*. The Astrophysical Journal **548**, 966–975 (2001).
- [5] P. Beiersdorfer, L. Schweikhard, J. R. Crespo López-Urrutia & K. Widman. *The magnetic trapping mode of an electron beam ion trap: New opportunities for highly charged ion research*. Review of Scientific Instruments **67**, 3818 (1996).
- [6] P. Beiersdorfer, S. von Goeler, M. Bitter & D. B. Thorn. *Measurement of the $3d \rightarrow 2p$ resonance to intercombination line-intensity ratio in neonlike Fe XVII, Ge XXIII, and Se XXV*. Physical Review A **64**, 032705 (2001).
- [7] P. Beiersdorfer. *Laboratory X-ray Astrophysics*. Annual Review of Astronomy and Astrophysics **41**, 343–390 (2003).
- [8] P. Beiersdorfer, M. Bitter, S. von Goeler & K. W. Hill. *Laboratory Measurements of the Fe XVII $2p$ - $3s$ and $2p$ - $3d$ Transitions and Comparison with Solar and Astrophysical Observations*. The Astrophysical Journal **610**, 616 (2004).
- [9] P. Beiersdorfer. *Persönliche Mitteilung* (12. September 2012).
- [10] C. Beilmann. *Über die Stärke mehrelektronischer Resonanzen bei der Photorekombination und -ionisation*. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität

Heidelberg (2012).

- [11] M. Bergh & N. Tîmneanu. *Interaction of ultrashort x-ray pulses with B₄C, SiC, and Si*. Physical Review E **77**, 026404 (2008).
- [12] S. Bernitt. *Optimierung der Ladungszustandsverteilung in einer EBIT durch resonante Photorekombination*. Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (2009).
- [13] H. F. Beyer & V. P. Shevelko. *Introduction to the Physics of Highly Charged Ions*. Institute of Physics Publishing (2003).
- [14] A. K. Bhatia, U. Feldman & J. F. Seely. *Atomic data and spectral line intensities for the neon isoelectronic sequence (Si V through Kr XXVII)*. Atomic Data and Nuclear Data Tables **32**, 435–469 (1985).
- [15] A. K. Bhatia & G. A. Doschek. *Atomic data and spectral line intensities for Ne-like Fe XVII*. Atomic Data and Nuclear Data Tables **52**, 1–23 (1992).
- [16] R. L. Blake, T. A. Chubb, H. Friedman & A. E. Unzicker. *Spectral and Photometric Measurements of Solar X-Ray Emission Below 60 Å*. The Astrophysical Journal **142**, 1 (1965).
- [17] N. Bloembergen. *Nonlinear Optics and Spectroscopy*. Science **216**, 1057–1064 (1982).
- [18] N. S. Brickhouse & J. T. Schmelz. *The Transparency of Solar Coronal Active Regions*. The Astrophysical Journal Letters **636**, L53 (2006).
- [19] G. V. Brown, P. Beiersdorfer, D. A. Liedahl & K. Widmann. *Laboratory Measurements and Modeling of the Fe XVII X-ray Spectrum*. The Astrophysical Journal **502**, 1015–1026 (1998).
- [20] G. V. Brown, P. Beiersdorfer, H. Chen, M. H. Chen & K. J. Reed. *Diagnostic Utility of the Relative Intensity of 3C to 3D in Fe XVII*. The Astrophysical Journal **557**, L75–L78 (2001).
- [21] G. V. Brown, P. Beiersdorfer, H. Chen, J. H. Scofield, K. R. Boyce, R. L. Kelley, C. A. Kilbourne, F. S. Porter, M. F. Gu, S. M. Kahn & A. E. Szymkowiak. *Energy-Dependent Excitation Cross Section Measurements of the Diagnostic Lines of Fe XVII*. Physical Review Letters **96**, 253201 (2006).
- [22] G. V. Brown & P. Beiersdorfer. *Antwort auf [90]*. Physical Review Letters **108**, 139302 (2012).
- [23] G. C. Claridge. *Coronium*. The Journal of the Royal Astronomical Society of Canada **XXXI**, 337–346 (1937).

- [24] J. Clementson. *Spectral modeling of Fe XVII pumped by a free-electron laser*. SPIE Proceedings **8140**, 81401C (2011).
- [25] A. Corney. *Atomic and Laser Spectroscopy*. Oxford University Press (Clarendon Press), Oxford (1977).
- [26] M. Cornille, J. Dubau & S. Jacquemot. *Radiative and collisional atomic data for neon-like ions*. Atomic Data and Nuclear Data Tables **58**, 1–66 (1994).
- [27] J. R. Crespo López-Urrutia. *The visible spectrum of highly charged ions: A window to fundamental physics*. Canadian Journal of Physics **86**, 111–123 (2008).
- [28] J. R. Crespo López-Urrutia, S. Bernitt, S. W. Epp, J. K. Rudolph, R. Steinbrügge, O. O. Versolato, J. Ullrich, S. M. Cavaletto, Z. Harman, C. Buth, C. H. Keitel, T. Pfeifer, A. Surzhykov, T. Jahrsetz, M. A. Leutenegger, F. S. Porter, N. Hell, S. Schippers, A. Müller, E. Träbert, G. V. Brown & P. Beiersdorfer. *Coherent population transfer upon X-ray laser excitation through laser induced state coupling to metastable states* (2013). Eingereicht als Strahlzeitantrag bei LCLS.
- [29] J. R. Crespo López-Urrutia. *Persönliche Mitteilung* (Februar 2013).
- [30] F. Currell & G. Fussmann. *Physics of Electron Beam Ion Traps and Sources*. IEEE Transactions on Plasma Science **33**, 1763–1777 (2005).
- [31] W. Demtröder. *Experimentalphysik 1 – Mechanik und Wärme*. Springer, Heidelberg, 3. Auflage (2003).
- [32] W. Demtröder. *Experimentalphysik 2 – Elektrizität und Optik*. Springer, Heidelberg, 3. Auflage (2004).
- [33] W. Demtröder. *Laserspektroskopie – Grundlagen und Techniken*. Springer, Heidelberg, 5. Auflage (2007).
- [34] K. P. Dere, E. Landi, H. E. Mason, B. C. Monsignori Fossi & P. R. Young. *CHIANTI – An Atomic Database For Emission Lines – Paper I: Wavelengths greater than 50 Å*. Astronomy and Astrophysics Supplement Series **125**, 149–173 (1997).
E. Landi, G. Del Zanna, P. R. Young, K. P. Dere & H. E. Mason. *CHIANTI – An Atomic Database for Emission Lines. XII. Version 7 of the Database*. The Astrophysical Journal **744**, 99 (2012).
- [35] E. D. Donets, V. I. Ilushenko & V. A. Alpert. *Ultrahigh vacuum electron beam ion source of highly stripped ions*. Proceedings of the 1st International Conference on Ion Sources, 635 (1969).

- [36] J. Dubau, D. Porquet & O. Z. Zabaydullin. *Absorption spectra of Fe L-lines in Seyfert 1 galaxies*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **81**, 117–124 (2003).
- [37] B. Edlén. *Die Deutung der Emissionslinien im Spektrum der Sonnenkorona*. Zeitschrift für Astrophysik **22**, 30–64 (1942).
- [38] B. Edlén. *The identification of the coronal lines (George Darwin Lecture)*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **105**, 323–333 (1945).
- [39] P. Emma, R. Akre, J. Arthur, R. Bionta, C. Bostedt, J. Bozek, A. Brachmann, P. Bucksbaum, R. Coffee, F.-J. Decker, Y. Ding, D. Dowell, S. Edstrom, A. Fisher, J. Frisch, S. Gilevich, J. Hastings, G. Hays, Ph. Hering, Z. Huang, R. Iverson, H. Loos, M. Messerschmidt, A. Miahnahri, S. Moeller, H.-D. Nuhn, G. Pile, D. Ratner, J. Rzepiela, D. Schultz, T. Smith, P. Stefan, H. Tompkins, J. Turner, J. Welch, W. White, J. Wu, G. Yocky & J. Galayda. *First lasing and operation of an ångstrom-wavelength free-electron laser*. Nature Photonics **4**, 641–647 (2010).
- [40] S. W. Epp. *Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH*. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (2007).
- [41] S. W. Epp, J. R. Crespo López-Urrutia, G. Brenner, V. Mäckel, P. H. Mokler, R. Treusch, M. Kuhlmann, M. V. Yurkov, J. Feldhaus, J. R. Schneider, M. Wellhöfer, M. Martins, W. Wurth & J. Ullrich. *Soft X-Ray Laser Spectroscopy on Trapped Highly Charged Ions at FLASH*. Physical Review Letters **98**, 183001+ (2007).
- [42] S. W. Epp, J. R. Crespo López-Urrutia, M. C. Simon, T. Baumann, G. Brenner, R. Ginzl, N. Guerassimova, V. Mäckel, P. H. Mokler, B. L. Schmitt, H. Tawara & J. Ullrich. *X-ray laser spectroscopy of highly charged ions at FLASH*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **43**, 194008+ (2010).
- [43] T. Fließbach. *Elektrodynamik – Lehrbuch zur Theoretischen Physik II*. Spektrum Akademischer Verlag, 4. Auflage (2005).
- [44] K. B. Fournier & S. B. Hansen. *Resolution of the long-standing overprediction of the resonance to intercombination line-intensity ratio in mid-Z neonlike ions*. Physical Review A **71**, 012717 (2005).
- [45] Chen. G.-X. *Converged Dirac R-matrix calculation of electron impact excitation of Fe XVII*. Physical Review A **76**, 062708 (2007).
- [46] S. Gasiorowicz. *Quantenphysik*. Oldenbourg, München, 9. Auflage (2005).
- [47] J. D. Gillaspy. *Highly charged ions*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular

- and Optical Physics **34**, R93–R130 (2001).
- [48] J. D. Gillaspy, T. Lin, L. Tedesco, J. N. Tan, J. M. Pomeroy, J. M. Laming, N. Brickhouse, Chen. G.-X. & E. Silver. *Fe XVII X-ray Line Ratios for Accurate Astrophysical Plasma Diagnostics*. The Astrophysical Journal **728**, 132 (2011).
 - [49] A. Graf, P. Beiersdorfer, G. V. Brown & M. F. Gu. *Measurement and Modeling of Na-like Fe XVI Inner-Shell Satellites*. The Astrophysical Journal **695**, 818–824 (2009).
 - [50] W. Grotrian. *Über den Intensitätsverlauf und das Intensitätsverhältnis der Koronallinien*. Zeitschrift für Astrophysik **2**, 26–45 (1933).
 - [51] HDF Group. *HDF5 User's Guide – HDF5 Release 1.8.10* (2012). Abgerufen von <http://www.hdfgroup.org> am 1. Februar 2013.
 - [52] M. F. Gu, T. Holczer, E. Behar & S. M. Kahn. *Inner-Shell Absorption Lines of Fe VI–Fe XVI: A Many-Body Perturbation Theory Approach*. The Astrophysical Journal **641**, 1227–1232 (2006).
 - [53] M. F. Gu. *The flexible atomic code*. Canadian Journal of Physics **86**, 675–689 (2008).
 - [54] M. F. Gu. *New Benchmark of X-ray Line Emission Models of Fe XVII* (2009). Verfügbar unter <http://arxiv.org/abs/0905.0519v1>.
 - [55] T. W. Hänsch. *Nobel Lecture: Passion for precision*. Review of Modern Physics **78**, 1297–1309 (2006).
 - [56] H. Haken & H. C. Wolf. *Atom- und Quantenphysik – Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*. Springer, Heidelberg, 8. Auflage (2004).
 - [57] Z. Harman & N. Oreshkina. *Persönliche Mitteilung* (3. Februar 2012).
 - [58] Z. Harman. *Persönliche Mitteilung* (14. August 2012).
 - [59] Z. Harman. *Persönliche Mitteilung* (10. September 2012).
 - [60] P. Heimann, O. Krupin, W. F. Schlotter, J. Turner, J. Krzywinski, F. Sorgenfrei, M. messerschmidt, D. Bernstein, J. Chalupsky, V. Hájková, S. Hau-Riege, M. Holmes, L. Juha, N. Kelez, J. Lüning, D. Nordlund, M. Fernandez Perea, A. Scherz, R. Soufli, W. Wurth & M. Rowen. *Linac Coherent Light Source soft x-ray materials science instrument optical design and monochromator commissioning*. Review of Scientific Instruments **82**, 093104 (2011).
 - [61] G. Herrmann. *Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams*. Journal of Applied Physics **29**, 127 (1958).

- [62] R. Holzwarth, Th. Udem & T. W. Hänsch. *Optical Frequency Synthesizer of Precision Spectroscopy*. Physical Review Letters **85**, 2264–2267 (2000).
- [63] J. D. Huba. *NRL Plasma Formulary* (2002). Herausgegeben vom Naval Research Laboratory Washington, DC.
- [64] D. P. Huenemoerder, A. Mitschang, D. Dewey, M. A. Nowak, N. S. Schulz, J. S. Nichols, J. E. Davis, J. C. Houck, H. L. Marshall, M. S. Noble, D. Morgan & C. R. Canizares. *TGCat: The Chandra Transmission Grating Data Catalog and Archive*. The Astronomical Journal **141**, 129 (2011). Datenabruf von <http://tgcatalog.mit.edu> erfolgt am 19. Dezember 2011.
- [65] R. J. Hutcheon, J. P. Pye & K. D. Evans. *The Spectrum of Fe XVII in the Solar Corona*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **175**, 489–499 (1976).
- [66] R. Ierusalimsky, L. H. de Figueiredo & W. Celes. *Lua 5.1 Reference Manual* (2006).
- [67] W. R. Johnson & G. Soff. *The Lamb Shift in Hydrogen-like atoms, $1 \leq Z \leq 110$* . Atomic Data and Nuclear Data Tables **33**, 405–446 (1985).
- [68] P. Jönsson, X. He, C. Froese Fischer & I. P. Grant. *The grasp2K relativistic atomic structure package*. Computer Physics Communications **177**, 597–622 (2007).
- [69] J. Kaastra & F. Paerls (Editors). *High-Resolution X-Ray Spectroscopy – Past, Present and Future*. Springer, Heidelberg (2011).
- [70] A. Kastler. *Quelques suggestions concernant la production optique et la détection optique d'une inégalité de population des niveaux de quantification spatiale des atomes. Application à l'expérience de Stern et Gerlach et à la résonance magnétique*. Le Journal de Physique et le Radium **11**, 255 (1950).
- [71] Y. S. Kim & R. H. Pratt. *Direct Radiative Recombination of Electrons with Atomic Ions: Cross Sections and Rate Coefficients*. Physical Review A **27**, 2913 (1983).
- [72] G. Kirchhoff. *Ueber die Fraunhofer'schen Linien*. Annalen der Physik **185**, 148–150 (1860).
- [73] G. Kirchhoff & R. Bunsen. *Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen*. Annalen der Physik **186**, 161–189 (1860).
- [74] G. Kirchhoff & R. Bunsen. *Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen*. Annalen der Physik **189**, 337–381 (1861).
- [75] P. Kirkpatrick & A. V. Baez. *Formation of optical images by x-rays*. Journal of

- the Optical Society of America **38**, 766–773 (1948).
- [76] A. Kramida, Y. Ralchenko, J. Reader & NIST ASD Team. *NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0)* (2012). Letzter Abruf von <http://physics.nist.gov/asd> am 25. Januar 2013.
 - [77] C. B. Lang & N. Pucker. *Mathematische Methoden in der Physik*. Spektrum, Heidelberg (1998).
 - [78] LCLS/SLAC. <http://lcls.slac.stanford.edu/> (1. Februar 2013).
 - [79] M. A. Levine, R. E. Marrs, J. R. Henderson, D. A. Knapp & M. B. Schneider. *The Electron Beam Ion Trap: A New Instrument for Atomic Physics Measurements*. Physica Scripta **T22**, 157 (1988).
 - [80] A. Lindblad, S. Svensson & K. Tiedtke. *A compendium on beam transport and beam diagnostic methods for Free Electron Lasers (IRUVX-PP Experts' Report)*. Deutsches Elektron Synchrotron DESY, EuroFEL (2011).
 - [81] J. M. J. Madey. *Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field*. Journal of Applied Physics **42**, 1906 (1971).
 - [82] V. Mäckel. *Laserspektroskopie hochgeladener Ionen an der Heidelberger Elektronenstrahl-Ionenfalle*. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (2010).
 - [83] V. Mäckel, R. Klawitter, G. Brenner, J. R. Crespo López-Urrutia & J. Ullrich. *Laser Spectroscopy on Forbidden Transitions in Trapped Highly Charged Ar¹³⁺ Ions*. Physical Review Letters **107**, 143002 (2011).
 - [84] G. Margaritondo & P. R. Rebernik. *A simplified description of X-ray free-electron lasers*. Journal of Synchrotron Radiation **18**, 101–108 (2011).
 - [85] R. E. Marrs, P. Beiersdorfer & D. Schneider. *The Electron-Beam Ion Trap*. Physics Today **47**, 27 (1994).
 - [86] D. L. McKenzie, P. B. Landecker, R. M. Broussard, H. R. Rugge, R. M. Young, U. Feldman & R. M. Young. *Solar flare X-ray spectra between 7.8 and 23.0 angstroms*. The Astrophysical Journal **241**, 409–416 (1980).
 - [87] R. Mewe, A. J. J. Raassen, J. J. Drake, J. S. Kaastra, R. L. J. van der Meer & D. Porquet. *CHANDRA-LETGS X-ray observations of Capella*. Astronomy and Astrophysics **368(3)**, 888–900 (2001).
 - [88] K. von Meÿenn (Hrsg.). *Die großen Physiker (Erster Band) – Von Aristoteles bis Kelvin*. C. H. Beck, München (1997).
 - [89] P. J. Mohr, B. N. Taylor & D. B. Newell. *CODATA recommended values of the*

- fundamental physical constants: 2010*. Reviews of Modern Physics **84** (2012).
Abgerufen von <http://physics.nist.gov/constants> am 1. Februar 2013.
- [90] V. K. Nikulin & M. B. Trzhaskovskaya. *Comment on „Energy-Dependent Excitation Cross Section Measurements of the Diagnostic Lines of Fe XVII“*. Physical Review Letters **108**, 139301 (2012).
- [91] NumPy community. *NumPy Reference – Release 1.6.0* (2011).
- [92] J. H. Parkinson. *New Observations of Fe XVII in the Solar X-ray Spectrum*. Astronomy and Astrophysics **24**, 215–218 (1973).
- [93] F. S. Porter, G. V. Brown, K. R. Boyce, R. L. Kelley, C. A. Kilbourne, P. Beiersdorfer, H. Chen, S. Terracol, S. M. Kahn & A. E. Szymkowiak. *The Astro-E2 X-ray spectrometer/EBIT microcalorimeter x-ray spectrometer*. Review of Scientific Instruments **75**, 3772–3774 (2004).
- [94] F. S. Porter, B. R. Beck, P. Beiersdorfer, K. R. Boyce, G. V. Brown, H. Chen, J. Gygas, S. M. Kahn, R. L. Kelley, C. A. Kilbourne, E. Magee & D. B. Thorn. *The XRS microcalorimeter spectrometer at the Livermore electron beam ion trap*. Canadian Journal of Physics **86**, 231–240 (2008).
- [95] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling & B. P. Flannery. *Numerical Recipes – The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Third Edition (2007).
- [96] Python Software Foundation. *Python v2.7.3 documentation* (2013).
- [97] R. B. Neal (General Editor). *The Stanford Two-Mile Accelerator*. W. A. Benjamin, New York (1968). Buch kann im Volltext unter <http://www.slac.stanford.edu/library/2MileAccelerator/2mile.htm> eingesehen werden.
- [98] J. K. Rudolph. *Dissertation, unveröffentlicht* (2013).
- [99] U. I. Safronova, C. Namba, I. Murakami, W. R. Johnson & M. S. Safronova. *Electric-dipole, electric-quadrupole, magnetic-dipole, and magnetic-quadrupole transitions in the neon isoelectronic sequence*. Physical Review A **64**, 012507 (2001).
- [100] W. F. Schlotter, J. J. Turner, M. Rowen, P. Heimann, M. Holmes, O. Krupin, M. Messerschmidt, S. Moeller, J. Krzywinski, R. Soufli, M. Fernandez-Perea, N. Kelez, S. Lee, R. Coffee, G. Hays, M. Beye, N. Gerken, F. Sorgenfrei, S. Hau-Riege, L. Juha, J. Chalupsky, V. Hajkova, A. P. Mancuso, A. Singer, O. Yefanov, I. A. Vartanyants, G. Cadenazzi, B. Abbey, K. A. Nugent, H. Sinn, J. Luning, S. Schaffert, S. Eisebitt, W.-S. Lee, A. Scherz, A. R. Nilsson & W. Wurth. *The soft x-ray instrument for materials studies at the linac coherent light source*

- x-ray free-electron laser*. Review of Scientific Instruments **83**, 043107 (2012).
- [101] P. Schneider. *Einführung in die Extragalaktische Astronomie und Kosmologie*. Springer, Heidelberg (2008).
- [102] K. Schnorr. *Laserspektroskopie hochgeladener Ionen an einer EBIT*. Diplomarbeit, Justus-Liebig-Universität Giessen (2011).
- [103] SciPy community. *SciPy Reference Guide – Release 0.11.0* (2012).
- [104] M. C. Simon, M. Schwarz, B. L. Schmitt, C. Beilmann, S. W. Epp, T. M. Baumann, K. Kubicek, R. Ginzler, S. G. Higgins, R. Klawitter, V. Mäkel, S. Bernitt, P. H. Mokler, J. Ullrich & J. R. Crespo López-Urrutia. *Photoionization of ions in arbitrary charge states by synchrotron radiation in an electron beam ion trap*. Journal of Physics: Conference Series **194**, 012009+ (2009).
- [105] M. C. Simon, M. Schwarz, S. W. Epp, C. Beilmann, B. L. Schmitt, Z. Harman, T. M. Baumann, P. H. Mokler, S. Bernitt, R. Ginzler, S. G. Higgins, C. H. Keitel, R. Klawitter, K. Kubiček, V. Mäkel, J. Ullrich & J. R. Crespo López-Urrutia. *Photoionization of N^{3+} and Ar^{8+} in an electron beam ion trap by synchrotron radiation*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **43**, 065003+ (2010).
- [106] M. C. Simon, J. R. Crespo López-Urrutia, C. Beilmann, M. Schwarz, Z. Harman, S. W. Epp, B. L. Schmitt, T. M. Baumann, E. Behar, S. Bernitt, R. Follath, R. Ginzler, C. H. Keitel, R. Klawitter, K. Kubiček, V. Mäkel, P. H. Mokler, G. Reichardt, O. Schwarzkopf & J. Ullrich. *Resonant and near-threshold photoionization cross sections of Fe^{14+}* . Physical Review Letters **105**, 183001+ (2010).
- [107] M. C. Simon. *Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle*. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (2010).
- [108] B. M. Smirnov. *Physics of Atoms and Ions*. Springer, Heidelberg (2003).
- [109] R. Soufli, M. Fernández-Perea, S. P. Hau-Riege, S. L. Baker, J. C. Robinson, E. M. Gullikson, J. D. Bozek, N. M. Kelez & S. Boutet. *Lifetime and damage threshold properties of reflective x-ray coatings for the LCLS free-electron laser*. SPIE Proceedings **8077**, 807702 (2011).
- [110] R. Steinbrügge. *Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung ladungsändernder Prozesse hochgeladener Ionen*. Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (2010).
- [111] R. Steinbrügge. *Dissertation, unveröffentlicht* (2013).
- [112] A. Surzhykov. *Persönliche Mitteilung* (11. März 2011).

- [113] A. Surzhykov. *Persönliche Mitteilung* (31. August 2012).
- [114] A. Thompson, D. Attwood, E. Gullikson, M. Howells, K.-J. Kim, J. Kirz, J. Kortright, I. Lindau, P. Pianetta, A. Robinson, J. Scofield, J. Underwood, D. Vaughan, G. Williams & H. Winick. *X-ray Data Booklet* (2001). Herausgegeben vom Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California. Inhalte abrufbar unter <http://xdb.lbl.gov>.
- [115] Th. Udem, R. Holzwarth & T. W. Hänsch. *Optical frequency metrology*. *Nature* **416**, 233–237 (2002).
- [116] A. Unsöld & B. Baschek. *Der Neue Kosmos – Einführung in die Astronomie und Astrophysik*. Springer, Heidelberg, 7. Auflage (2002).
- [117] H. van Regemorter. *Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres*. *Astrophysical Journal* **136**, 906 (1962).
- [118] A. Weigert, H. J. Wendker & L. Wisotzki. *Astronomie und Astrophysik – Ein Grundkurs*. Wiley-VCH, Weinheim, 4. Auflage (2005).
- [119] H. Xu, S. M. Kahn, J. R. Peterson, E. Behar, F. B. S. Paerels, R. F. Mushotzky, J. G. Jernigan, A. C. Brinkman & K. Makishima. *High-Resolution Observations of the Elliptical Galaxy NGC 4636 with the Reflection Grating Spectrometer on Board XMM-Newton*. *The Astrophysical Journal* **579**, 600 (2002).

Das einleitende Zitat von von Steven Weinberg in Kapitel 6 stammt aus: S. Weinberg. *The First Three Minutes – A Modern View of the Origin of the Universe*. Basic Books, New York, Updated Edition (1993).

Danksagung

Diese Arbeit wäre ohne die Unterstützung von vielen Seiten nicht möglich gewesen. Ich danke deshalb allen Beteiligten auf beiden Seiten des Atlantiks. Ich danke allen Wissenschaftlern, Technikern, Verwaltungsangestellten, Mitarbeitern von Transportdienstleistern, Fluggesellschaften, Autovermietungen, Hotels und Gästehäusern. Ich danke allen Kollegen, die direkt am Experiment beteiligt waren, und auch denjenigen, die uns anderweitig unterstützt haben. Ich denke denen, die mir durch ihr Vertrauen ermöglicht haben, spannende Forschung zu betreiben und dabei interessante Orte und Menschen kennenzulernen. Und ganz besonders bedanke ich mich bei meiner Familie.

Danke.

Erklärung

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den

.....

Sven Bernitt